

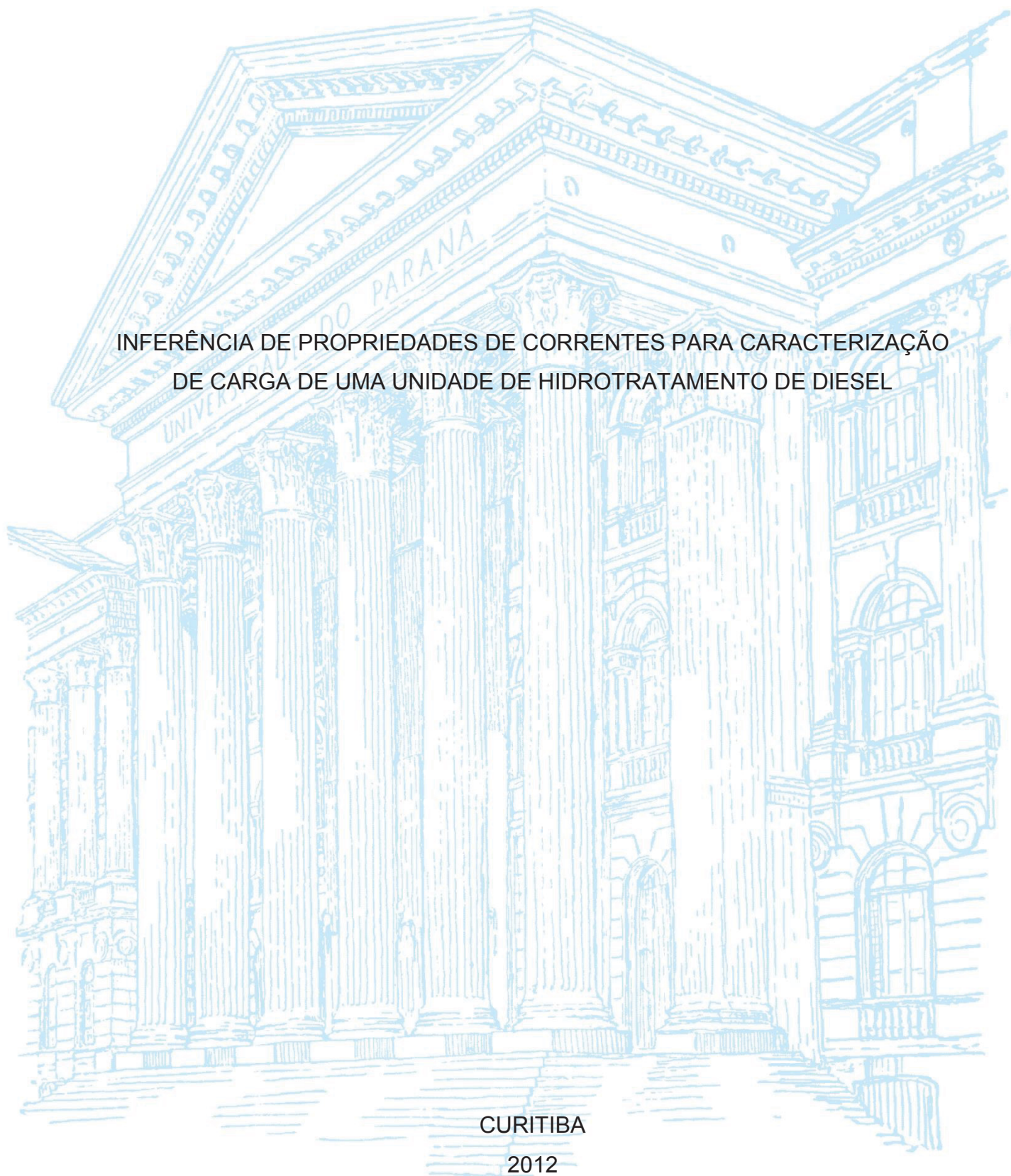
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

JUSCELINO JOUCOWSKI

INFERÊNCIA DE PROPRIEDADES DE CORRENTES PARA CARACTERIZAÇÃO
DE CARGA DE UMA UNIDADE DE HIDROTRATAMENTO DE DIESEL

CURITIBA

2012



JUSCELINO JOUNCOWSKI

INFERÊNCIA DE PROPRIEDADES DE CORRENTES PARA CARACTERIZAÇÃO
DA CARGA DE UMA UNIDADE DE HIDROTRATAMENTO DE DIESEL

Dissertação apresentada como requisito parcial à
obtenção do grau de Mestre em Engenharia
Química, no Curso de Pós-Graduação em
Engenharia Química, Setor de Tecnologia, da
Universidade Federal do Paraná

Orientador: Prof. Dr. Marcos Lúcio Corazza

Coorientador: Prof. Dr. Marcelo Kaminski Lenzi

CURITIBA

2012

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

J86i Joucowski, Juscelino
Inferência de propriedades de correntes para caracterização da carga
de uma unidade de hidrotratamento de diesel / Juscelino Joucowski. –
Curitiba, 2012.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Paraná, Setor de
Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.

Orientador: Marcos Lúcio Corazza

Coorientador: Marcelo Kaminski Lenzi

1. Combustíveis. 2. Diesel –Tratamento. 3. Redes neurais. 4.
Modelos lineares (Estatística). I. Corazza, Marcos Lúcio. II. Lenzi,
Marcelo Kaminski. II. Título.

CDD 665.5384

Bibliotecária: Roseny Rivelini Morciani CRB-9/1585

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

SETOR DE TECNOLOGIA

Departamento de Engenharia Química

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

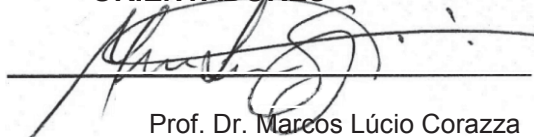
INFERÊNCIA DE PROPRIEDADES DE CORRENTES PARA CARACTERIZAÇÃO DA CARGA DE UMA UNIDADE DE HIDROTRATAMENTO DE DIESEL

JUSCELINO JOUCOWSKI

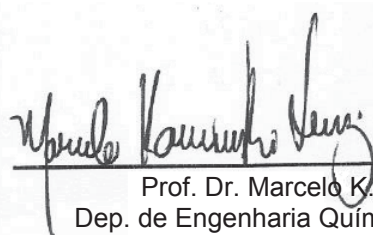
Dissertação de Mestrado submetida ao Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal do Paraná, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química.

Aprovada por:

ORIENTADORES



Prof. Dr. Marcos Lúcio Corazza
Dep. de Engenharia Química / UFPR



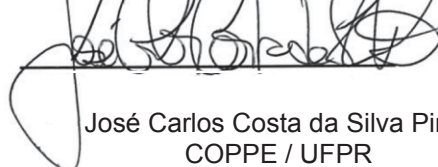
Prof. Dr. Marcelo K. Lenzi
Dep. de Engenharia Química / UFPR

EXAMINADOR INTERNO



Prof. Dr. Papa Matar Ndiaye
Dep. de Engenharia Química / UFPR

EXAMINADOR EXTERNO



José Carlos Costa da Silva Pinto
COPPE / UFPR

CURITIBA

2012

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

JOUCOWSKI, J. **Inferência de propriedades de correntes para caracterização da carga de uma unidade de hidrotratamento de diesel**. Publicação: DEQ/UFPR, Curitiba-PR, 2012. 160 p.

CESSÃO DE DIREITOS

Autor: Juscelino Joucowski
Título: **Inferência de propriedades de correntes para caracterização da carga de uma unidade de hidrotratamento de diesel**
Grau: Mestre
Ano: 2012

É concedida, à Universidade Federal do Paraná e à Petrobras, permissão para reproduzir, emprestar ou vender cópias desta dissertação somente para propósitos acadêmicos e científicos e com o consentimento do autor. O autor reserva outros direitos de publicação, não podendo ser reproduzidas quaisquer partes desta dissertação sem prévia autorização do autor.

Juscelino Joucowski

Dedicado a todos aqueles que buscam a ciência acima de tudo como forma de buscar as respostas aos desígnios e as leis do Senhor.

AGRADECIMENTOS

Vamos agradecer primeiramente a Deus e a seu filho Jesus. Eles que me deram esperança em continuar e acreditar que, por mais difícil que fosse o obstáculo a ser superado, ele o seria porque eles estariam do meu lado.

Seguindo a ordem, tenho que agradecer à minha esposa Anelise e aos meus cães, Bidu, Lilica e Lucky, pela paciência cavalgar que tiveram durante o período que cursei o mestrado, e principalmente, durante os períodos de redação da dissertação. Espero agora ter mais tempo para cuidar e ficar com vocês, porque se vocês não merecem, ninguém merecerá.

Na sequência farei meus agradecimentos profissionais àqueles que contribuíram para o andamento deste trabalho: ao técnico de operação Décio Luiz Rogal, por sua imensa ajuda em me ensinar o funcionamento da fracionadora de FCC e fornecer material que norteou o andamento deste trabalho; aos engenheiros Douglas Falleiros Barbosa Lima e Fernando Ademar Zanella, pelas opiniões emitidas durante a etapa de geração das inferências; aos engenheiros Edelar Cerrutti e Eliza Diamante, pelos valiosos dados fornecidos; e aos demais que me auxiliaram direta ou indiretamente na conclusão deste trabalho.

Em relação ao meio acadêmico, cabe meu agradecimento aos professores Marcos L. Corazza e Marcelo K. Lenzi pela contribuição com as ideias e com a estruturação do trabalho final. Espero que este trabalho tenha atendido às expectativas acadêmicas a mim colocadas.

Por fim, quero agradecer aos meus amigos e aos meus inimigos. Aos amigos, pelo apoio; aos inimigos, mais ainda, pois eles são vetores do meu crescimento pessoal e profissional, como já dizia Benjamin Franklin: “ama os teus inimigos, porque eles falam-te dos teus defeitos”.

*O homem razoável se adapta ao mundo;
O irascível tenta adaptar o mundo a si próprio;
Assim, o progresso depende do homem irascível.*

Bernard Shaw

RESUMO

A necessidade intensiva do uso de unidades de hidrotratamento para a produção de diesel vem levando as empresas petrolíferas a buscar alternativas que visem enquadrar as correntes produzidas o mais próximo possível das especificações estabelecidas, de forma a evitar reprocessamentos, reduzir o give-away de propriedades, reduzir o consumo de hidrogênio e utilidades. Entretanto, uma das principais dificuldades para a obtenção do diesel de baixo teor de enxofre é a presença de compostos da família dos dibenzotiofenos presentes principalmente no LCO oriundo das unidades de craqueamento catalítico, que apresentam dificuldade de serem hidrotratados devido às baixas velocidades de reação apresentadas decorrentes da existência de impedimento estérico. Uma das possíveis formas de contornar este problema é através do controle do ponto de ebulição da carga, o que reduz ou elimina as espécies refratárias da carga. Este controle, entre várias outras formas possíveis, pode ser realizado com a implementação de sensores virtuais, utilizando-se de dados disponíveis de temperatura, pressão e vazão na fracionadora do FCC para inferir a destilação do LCO e controlar os 90% vaporizados. Desta forma, o objetivo deste trabalho foi desenvolver um conjunto de sensores virtuais utilizando modelos lineares e redes neurais em um conjunto de dados extraídos de uma planta industrial para acompanhamento da destilação do LCO e especificamente dos 90% vaporizados. Foram cruzados dados de análises e de operação de 18 meses, e com base nestes dados foram rodados diversos modelos para diversos pontos de destilação. Ao final, foram definidos os melhores modelos lineares e redes neurais que serão implementados à rotina de acompanhamento e aos sistemas de controle da planta.

Palavras-chave: Inferência. LCO. Diesel ULSD. Sensores virtuais. Redes neurais. Correlações lineares.

ABSTRACT

The intensive necessity of the use of hydrotreating units for diesel production is pushing petroleum companies to seek alternatives for meeting regulations constrains in order to avoid reprocessing, reduce give-away and reduce hydrogen and utilities consumption. However, one of the main difficulties in obtaining ULSD is the presence of dibenzothiophenes compounds that exist mainly in LCO arising from FCC units, which have difficult in being hydrotreated due to low reaction rates related to the existence of steric hindrance. One of the possible ways to deal with this problem is by controlling feed boiling point, which reduces or eliminates those refractory species. This control, among many other possible forms, can be accomplished with the implementation of soft sensors using pressure, flow and temperature measurements for inferring LCO distillation. Thus, the aim of this work was to develop a set of soft sensors using linear models and artificial neural networks into a set of data extracted from an industrial facility to monitor LCO distillation and to control 90% cut. About 18 months of lab and operation data were crossed, and based on this query several models were developed for different cutpoints. At the end, the best linear models and neural networks were chosen and will be implemented to the monitoring routine and to the control system of the plant

Keywords: Inferential. LCO. ULSD. Soft sensors. Neural networks. Linear correlations.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2-1 – TEORES DE ENXOFRE NO DIESEL NA AMÉRICA LATINA.....	23
FIGURA 2-2 – EVOLUÇÃO DA QUALIDADE DO DIESEL NO BRASIL	24
FIGURA 2-3 – ESQUEMA DE REFINO TÍPICO	26
FIGURA 2-4 – FLUXOGRAMA DE PROCESSO DE UMA UNIDADE DE HIDROTRATAMENTO	27
FIGURA 2-5 – CURVA DE ESPECIAÇÃO DE ENXOFRE NO ÁRABE MÉDIO.....	32
FIGURA 2-6 – ESTRUTURA ATÔMICA DO 4,6-DIMETIL-BIBENZOTIOFENO	33
FIGURA 2-7 – CONSTANTES DE PSEUDO-PRIMEIRA ORDEM (EM MOL.G ⁻¹ .MIN ⁻¹) DO SISTEMA DE DMDBT SOBRE MO/G-AL ₂ O ₃ À 300° E 10 KPA DE H ₂ S [12].....	34
FIGURA 2-8 – VOLUME RELATIVO DO REATOR EM FUNÇÃO DO PONTO FINAL [16]	36
FIGURA 2-9 – TAXAS DE REAÇÃO DE DIVERSOS COMPOSTOS COM DIFERENTES PONTOS DE EBULIÇÃO	37
FIGURA 2-10 – COMPARAÇÃO DE PROPRIEDADES UTILIZANDO GRÁFICOS DE LINHAS	44
FIGURA 2-11 – COMPARAÇÃO DE PROPRIEDADES USANDO GRÁFICOS DE DISPERSÃO	44
FIGURA 2-12 – ESQUEMA DE UMA REDE TIPO MLP [32]	49
FIGURA 3-1 – PROCEDIMENTO PARA IDENTIFICAÇÃO DO SENSOR VIRTUAL.....	55
FIGURA 3-2 – FLUXOGRAMA DE UMA FRACIONADORA DE FCC.....	56
FIGURA 3-3 – REDE MLP DO TIPO 01.....	64
FIGURA 3-4 – REDE MLP DO TIPO 02.....	64
FIGURA 3-5 – REDE MLP DO TIPO 03.....	65
FIGURA 3-6 – GMDMS – CONJUNTO 01 – 10% VAPORIZADOS	68
FIGURA 3-7 – GMDMS – CONJUNTO 02 – 10% VAPORIZADOS	69
FIGURA 3-8 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR ML DE 10% VAPORIZADOS	71
FIGURA 3-9 – CURVA DE RESÍDUOS PARA 10 % VAPORIZADOS.....	71
FIGURA 3-10 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR RN PARA 10 % VAPORIZADOS	73
FIGURA 3-11 – GMDMS – CONJUNTO 01 – 30 % VAPORIZADOS	76

FIGURA 3-12 – GMDMS – CONJUNTO 02 – 30% VAPORIZADOS	77
FIGURA 3-13 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR ML PARA 30 % VAPORIZADOS	79
FIGURA 3-14 – CURVA DE RESÍDUOS PARA 30 % VAPORIZADOS	79
FIGURA 3-15 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR RN PARA 30 % VAPORIZADOS	80
FIGURA 3-16 – GMDMS – CONJUNTO 01 – 50 % VAPORIZADOS	84
FIGURA 3-17 – GMDMS – CONJUNTO 02 – 50 % VAPORIZADOS	85
FIGURA 3-18 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR ML DE 50 % VAPORIZADOS	87
FIGURA 3-19 – CURVA DE RESÍDUOS PARA 50 % VAPORIZADOS	87
FIGURA 3-20 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR RN PARA 50 % VAPORIZADOS	88
FIGURA 3-21 – GMDMS – CONJUNTO 01 – 70 % VAPORIZADOS	91
FIGURA 3-22 – GMDMS – CONJUNTO 02 – 70 % VAPORIZADOS	92
FIGURA 3-23 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR ML DE 70 % VAPORIZADOS	94
FIGURA 3-24 – CURVA DE RESÍDUOS PARA 70% VAPORIZADOS	94
FIGURA 3-25 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR RN PARA 70 % VAPORIZADOS	95
FIGURA 3-26 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR RN MODIFICADA PARA 70 % VAPORIZADOS	96
FIGURA 3-27 – GMDMS – 90 % VAPORIZADOS	99
FIGURA 3-28 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR ML DE 90 % VAPORIZADOS	101
FIGURA 3-29 – CURVA DE RESÍDUOS PARA 90 % VAPORIZADOS	101
FIGURA 3-30 — VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR RN PARA 90% VAPORIZADOS	102

LISTA DE TABELAS

TABELA 2-1 — EVOLUÇÃO DAS ESPECIFICAÇÕES DO DIESEL NA CE	21
TABELA 2-2 – COMPARAÇÃO DE DIVERSOS MÉTODOS	42
TABELA 3-1 – LISTA DE VARIÁVEIS DA FRACIONADORA.....	57
TABELA 3-2 – LISTA DE VARIÁVEIS OCULTAS.....	58
TABELA 3-3 – PROPRIEDADES DAS CORRENTES	58
TABELA 3-4 - VARIÁVEIS CALCULADAS	59
TABELA 3-5 – MC PARA 10 % VAPORIZADOS	67
TABELA 3-6 – PESOS DOS NEURÔNIOS PARA MELHOR RN 10 % VAPORIZADOS	73
TABELA 3-7 – PESOS NEURÔNIOS INTERMEDIÁRIOS PARA MELHOR RN 10% VAPORIZADOS	73
TABELA 3-8 – ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DA MELHOR RN PARA 10% VAPORIZADOS	74
TABELA 3-9 – MC PARA 30% VAPORIZADOS	75
TABELA 3-10 — PESOS DOS NEURÔNIOS ENTRADA DA MELHOR RN 30% VAPORIZADOS	81
TABELA 3-11 — PESOS DOS NEURÔNIOS INTERMEDIÁRIOS DA MELHOR RN 30% VAPORIZADOS	81
TABELA 3-12 — ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DA MELHOR RN PARA 30% VAPORIZADOS	82
TABELA 3-13 — MC PARA 50% VAPORIZADOS.....	83
TABELA 3-14 — PESOS DOS NEURÔNIOS ENTRADA DA MELHOR RN 50% VAPORIZADOS	89
TABELA 3-15 — PESOS DOS NEURÔNIOS INTERMEDIÁRIOS DA MELHOR RN 50% VAPORIZADOS	89
TABELA 3-16 — ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DA MELHOR RN PARA 50% VAPORIZADOS	89
TABELA 3-17 — MATRIZ DE CORRELAÇÃO PARA 70% VAPORIZADOS	90
TABELA 3-18 — PESOS DOS NEURÔNIOS ENTRADA DA MELHOR RN MODIFICADA DE 70% VAPORIZADOS.....	97
TABELA 3-19 — PESOS DOS NEURÔNIOS INTERMEDIÁRIOS DA MELHOR RN MODIFICADA DE 70% VAPORIZADOS.....	97

TABELA 3-20 — ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DA MELHOR RN PARA 70% VAPORIZADOS	97
TABELA 3-21 — MATRIZ DE CORRELAÇÃO PARA 90% VAPORIZADOS	98
TABELA 3-22 — PESOS DOS NEURÔNIOS ENTRADA DA MELHOR RN 90% VAPORIZADOS	103
TABELA 3-23 — PESOS DOS NEURÔNIOS INTERMEDIÁRIOS DA MELHOR RN 90% VAPORIZADOS	103
TABELA 3-24 — ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DA MELHOR RN PARA 90% VAPORIZADOS	103
TABELA 6-1 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 10% VAPORIZADOS	110
TABELA 6-2 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 10% VAPORIZADOS	110
TABELA 6-3 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 10% VAPORIZADOS	110
TABELA 6-4 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 10% VAPORIZADOS	110
TABELA 6-5 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 10% VAPORIZADOS	111
TABELA 6-6 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 10% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS	111
TABELA 6-7 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 10% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS	111
TABELA 6-8 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 10% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS	111
TABELA 6-9 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 10% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS	112
TABELA 6-10 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 10% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	112
TABELA 6-11 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 30% VAPORIZADOS	113
TABELA 6-12 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 30% VAPORIZADOS	113

TABELA 6-13 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 30%	
VAPORIZADOS	113
TABELA 6-14 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 30%	
VAPORIZADOS	113
TABELA 6-15 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 30%	
VAPORIZADOS	114
TABELA 6-16 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 30%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	114
TABELA 6-17 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 30%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	114
TABELA 6-18 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 30%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	114
TABELA 6-19 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 30%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	115
TABELA 6-20 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 30%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	115
TABELA 6-21 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 50%	
VAPORIZADOS	116
TABELA 6-22 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 50%	
VAPORIZADOS	116
TABELA 6-23 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 50%	
VAPORIZADOS	116
TABELA 6-24 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 50%	
VAPORIZADOS	116
TABELA 6-25 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 50%	
VAPORIZADOS	117
TABELA 6-26 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 50%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	117
TABELA 6-27 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 50%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	117
TABELA 6-28 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 50%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	117
TABELA 6-29 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 50%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	118

TABELA 6-30 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 50%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	118
TABELA 6-31 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 70%	
VAPORIZADOS	119
TABELA 6-32 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 70%	
VAPORIZADOS	119
TABELA 6-33 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 70%	
VAPORIZADOS	119
TABELA 6-34 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 70%	
VAPORIZADOS	119
TABELA 6-35 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 70%	
VAPORIZADOS	120
TABELA 6-36 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 70%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	120
TABELA 6-37 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 70%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	120
TABELA 6-38 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 70%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	120
TABELA 6-39 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 70%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	121
TABELA 6-40 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 70%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	121
TABELA 6-41 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 90%	
VAPORIZADOS	122
TABELA 6-42 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 90%	
VAPORIZADOS	122
TABELA 6-43 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 90%	
VAPORIZADOS	122
TABELA 6-44 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 90%	
VAPORIZADOS	122
TABELA 6-45 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 90%	
VAPORIZADOS	123
TABELA 6-46 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 90%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	123

TABELA 6-47 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 90%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	123
TABELA 6-48 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 90%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	123
TABELA 6-49 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 90%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	124
TABELA 6-50 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 90%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	124
TABELA 6-51 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 06 PARA 90%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	124
TABELA 6-52 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 07 PARA 90%	
VAPORIZADOS SEM OUTLIERS.....	125
TABELA 6-53 — RN TIPO 01 / 50% TREINO E 50% TESTE PARA 10%	
VAPORIZADOS	126
TABELA 6-54 — RN TIPO 01 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 10%	
VAPORIZADOS	127
TABELA 6-55 — RN TIPO 01 / 90% TREINO E 10% TESTE PARA 10%	
VAPORIZADOS	128
TABELA 6-56 — RN TIPO 02 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 10%	
VAPORIZADOS	129
TABELA 6-57 — RN TIPO 03 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 10%	
VAPORIZADOS	130
TABELA 6-58 — RN TIPO 01 / 50% TREINO E 50% TESTE PARA 30%	
VAPORIZADOS	131
TABELA 6-59 — RN TIPO 01 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 30%	
VAPORIZADOS	132
TABELA 6-60 — RN TIPO 01 / 90% TREINO E 10% TESTE PARA 30%	
VAPORIZADOS	133
TABELA 6-61 — RN TIPO 02 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 30%	
VAPORIZADOS	134
TABELA 6-62 — RN TIPO 03 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 30%	
VAPORIZADOS	135
TABELA 6-63 — RN TIPO 01 / 50% TREINO E 50% TESTE PARA 50%	
VAPORIZADOS	136

TABELA 6-64 — RN TIPO 01 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 50% VAPORIZADOS	137
TABELA 6-65 — RN TIPO 01 / 90% TREINO E 10% TESTE PARA 50% VAPORIZADOS	138
TABELA 6-66 — RN TIPO 02 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 50% VAPORIZADOS	139
TABELA 6-67 — RN TIPO 03 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 50% VAPORIZADOS	140
TABELA 6-68 — RN TIPO 01 / 50% TREINO E 50% TESTE PARA 70% VAPORIZADOS	141
TABELA 6-69 — RN TIPO 01 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 70% VAPORIZADOS	142
TABELA 6-70 — RN TIPO 01 / 90% TREINO E 10% TESTE PARA 70% VAPORIZADOS	143
TABELA 6-71 — RN TIPO 02 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 70% VAPORIZADOS	144
TABELA 6-72 — RN TIPO 03 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 70% VAPORIZADOS	145
TABELA 6-73 — RN TIPO 01 MODIFICADA / 70% TREINO / 30% TESTE PARA 70% VAPORIZADOS	146
TABELA 6-74 — RN TIPO 02 MODIFICADA / 70% TREINO / 30% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS	147
TABELA 6-75 — RN TIPO 03 MODIFICADA / 70% TREINO / 30% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS	148
TABELA 6-76 — RN TIPO 01 / 50% TREINO E 50% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS	149
TABELA 6-77 — RN TIPO 01 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS	150
TABELA 6-78 — RN TIPO 01 / 90% TREINO E 10% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS	151
TABELA 6-79 — RN TIPO 02 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS	152
TABELA 6-80 — RN TIPO 03 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS	153

TABELA 6-81 — RN TIPO 01 MODIFICADA / 70% TREINO / 30% TESTE PARA
90% VAPORIZADOS154

TABELA 6-82 — RN TIPO 02 MODIFICADA / 70% TREINO / 30% TESTE PARA
90% VAPORIZADOS155

TABELA 6-83 — RN TIPO 03 MODIFICADA / 70% TREINO / 30% TESTE PARA
90% VAPORIZADOS156

LISTA DE ABREVIATURAS OU SIGLAS

ANP	Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis	
BFGS	Broyden-Fletcher-Godfarb-Shannon	
CEN	Comitê Europeu de Normalização	
CHPS	Vaso Separador de Alta Pressão à Frio	
CLPS	Vaso Separador de Baixa Pressão à Frio	
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente	
EPA	US Environmental Protection Agency	
FCC	Craqueamento Catalítico Fluído	
GLP	Gás Liquefeito de Petróleo	
HCO	Óleo Pesado de Reciclo	h^{-1}
HDS	Hidrodessulfurização	$^{\circ}C$
HDT	Hidrotratamento	
HHPS	Vaso Separador de Alta Pressão à Quente	
HLPS	Vaso Separador de Baixa Pressão à Quente	
LCO	Óleo leve de reciclo	
LSD	Diesel de baixo teor de enxofre	
LSHV	Velocidade Espacial	
ML	Modelo Linear	
MLP	Multi-Layer Perceptron	
NCP	Nafta Craqueada Pesada	
ppm	Parte por milhão	
PROCONVE	Programa de Controle da Poluição do Ar por Veículos Automotores	
RN	Rede Neural	
SDCD	Sistema Digital de Controle Distribuído	
UE	União Europeia	
ULSD	Diesel de baixíssimo teor de enxofre	
UOP	Produtos Universais de Petróleo	
URE	Unidade de recuperação de enxofre	
WABT	Temperatura média ponderada do leite	

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Latinos

A	Coeficiente de Antoine	—
a_i	Coeficientes das correlações lineares obtidas na modelagem	—
B	Coeficiente de Antoine	—
B_i	Coeficiente de Clausius-Clayperon	—
b_i	Coeficientes das correlações lineares modificadas	—
b_k	Bias do neurônio k	—
d	Parâmetro de inclinação da função logística	—
h	Entalpia molar	J.mol ⁻¹
h_f	Entalpia molar do líquido	J.mol ⁻¹
h_g	Entalpia molar do gás	J.mol ⁻¹
P	Pressão	bar
p	Pressão	bar
PCT	Temperatura Compensada pela Pressão	°C ou K
P_{pH_2}	Pressão parcial do hidrogênio	bar
P_r	Pressão de referência	bar
P_{ref}	Pressão de referência	bar
Q	Vazão Volumétrica	m ³ .h ⁻¹
R	Constante universal dos gases	J.mol ⁻¹ .K ⁻¹
S	Entropia	J.K ⁻¹
s	Entropia	J.K ⁻¹
T	Temperatura	K
T_{comp}	Temperatura compensada	°C
T_{Corr}	Temperatura corrigida	K
$T_{entrada}$	Temperatura de entrada	°C
T_k	Temperatura do Prato	°C
TX_{Corr_i}	Saída da correlação i	°C
v	Volume	m ³
V_{cat}	Volume de catalisador em um leito	m ³
v_f	Volume molar do líquido	m ³ .mol ⁻¹
v_g	Volume molar do gás	m ³ .mol ⁻¹
V_i	Fração volumétrica do leito	—
x_j	Entrada j para o somador	—
y_{H_2}	Fração molar de hidrogênio	—
y_k	Saída do neurônio k	—

Símbolos Gregos

ΔT	Diferença de temperatura entre entrada e saída do leito	°C
σ^2	Variância de uma determinada propriedade	
ΔH_{vap}	Entalpia molar de vaporização	J.mol ⁻¹
φ	Função de transferência	
ω_{kj}	Peso de um neurônio ou peso sináptico	

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	18
1.1.	MOTIVAÇÃO	18
2.	REVISÃO DE LITERATURA.....	20
2.1.	EVOLUÇÃO DAS ESPECIFICAÇÕES DO DIESEL	20
2.1.1.	Evolução das Especificações na UE	21
2.1.2.	Evolução das Especificações nos EUA	22
2.1.3.	Evolução das Especificações na América Latina.....	22
2.1.4.	Evolução das Especificações no Brasil	23
2.2.	UNIDADE DE HIDROTRATAMENTO	25
2.2.1.	Descrição Geral de um Processo de HDT de Diesel	27
2.3.	DIFICULDADES DA OBTENÇÃO DO DIESEL ULSD	31
2.3.1.	Importância do Controle do Corte da Carga Processada	35
2.4.	SENSORES VIRTUAIS	37
2.4.1.	Sensores e Instrumentos Virtuais	38
2.4.3.	Métodos de Desenvolvimento de Inferências	41
2.4.4.	Verificações Importantes para a Implementação de Inferências	43
2.5.	REDES NEURAIS	46
2.5.1.	Modelo de um Neurônio	47
2.5.2.	Redes MLP	49
2.5.3.	Método BFGS	51
2.6.	CORRELAÇÕES LINEARES	51
2.6.1.	Aplicações para Obtenção de Inferências	51
2.6.2.	Temperatura Corrigida.....	52
3.	DESENVOLVIMENTO DO SENSOR VIRTUAL.....	55
3.1.	SELEÇÃO DE DADOS HISTÓRICOS.....	60
3.2.	FILTRAGEM E ELIMINAÇÃO DE OUTLIERS.....	60
3.3.	ESTRUTURAÇÃO DOS MODELOS E SELEÇÃO DOS PARÂMETROS DE REGRESSÃO.....	61
3.4.	ESTIMAÇÃO DOS MODELOS.....	66
3.4.1.	Temperatura 10% Vaporizados	67
3.4.1.1.	Matriz de Correlação	67
3.4.1.2.	Correlações Lineares Avaliadas	70

3.4.1.3. Redes Neurais Avaliadas	72
3.4.2. Temperatura 30% Vaporizados	75
3.4.2.1. Matriz de Correlação	75
3.4.2.2. Correlações Lineares Avaliadas	78
3.4.2.3. Redes Neurais Avaliadas	80
3.4.3. Temperatura 50% Vaporizados	83
3.4.3.1. Matriz de Correlação	83
3.4.3.2. Correlações Lineares Avaliadas	86
3.4.3.3. Redes Neurais Avaliadas	88
3.4.4. Temperatura 70% Vaporizados	90
3.4.4.1. Matriz de correlação	90
3.4.4.2. Correlações Lineares Avaliadas	93
3.4.4.3. Redes Neurais Avaliadas	95
3.4.5. Temperatura 90% Vaporizados	98
3.4.5.1. Matriz de correlação	98
3.4.5.2. Correlações lineares avaliadas.....	100
3.4.5.3. Redes Neurais Avaliadas	102
4. CONCLUSÕES	104
5. REFERÊNCIAS	106
6. ANEXOS	110
ANEXO A – CORRELAÇÕES LINEARES: RESULTADOS	110
ANEXO B – REDES NEURAS: RESULTADOS	126

1. INTRODUÇÃO

1.1. MOTIVAÇÃO

O uso de processos de hidrotratamento para enquadramento dos produtos obtidos pelo refino do petróleo é hoje indispensável devido às restrições ambientais cada vez maiores impostas à produção de combustíveis. O diesel, a gasolina e o querosene, produtos que há poucas décadas possuíam especificações relativamente folgadas, têm hoje faixas de produção cada vez mais restritivas, principalmente nos quesitos de enxofre, destilação e propriedades de combustão (número de cetano para diesel, octanagem para gasolina).

Entretanto, esse estreitamento das especificações tem levado os refinadores a grandes desafios para a otimização da produção dos derivados, especialmente para a obtenção do diesel ULSD, pois geralmente as unidades existentes em seus parques de refino foram projetadas para cenários muito diferentes dos atuais e futuros. As alternativas para resolução desses problemas são inúmeras, desde a aplicação de retrofits em unidades existentes (com a instalação de novos reatores, sistemas de purificação do gás de reciclo, estrangulamento de pressão no sistema de reação), a substituição de catalisadores por outros de tecnologia mais avançada ou ainda o controle de carga da unidade, entre outras.

Em um universo de curto prazo, a implementação de projetos de retrofit e de substituição de catalisador por outro de tecnologia mais recente pode ser inviável, tanto pelo tempo de implementação do empreendimento (em geral não menor que 2 anos e podendo na prática chegar a 4 anos no Brasil) como pela disponibilidade de espaço ou do hardware disponível.

Felizmente, para unidades de hidrotratamento de diesel, o controle de carga pode ser uma alternativa viável e rápida para a obtenção de diesel de baixo teor de enxofre (LSD e ULSD) com a unidade existente. Além disso, mesmo com a existência de unidades de maior e menor severidade em uma mesma planta, o controle de carga é de vital importância, pois permite a maximização do tempo de campanha de ambas as unidades, evitando assim paradas para troca de catalisador com consequente perda de rentabilidade da refinaria.

Ainda, mesmo com a implementação de um retrofit, o controle de carga pode reduzir bastante os custos de implementação do empreendimento, permitindo assim um tempo de campanha minimamente aceitável mesmo com a reutilização dos equipamentos existentes.

Logo, para a execução desta ação, torna-se necessária a caracterização adequada da carga para que se atinja o objetivo desejado, que é a produção de diesel com baixo teor de enxofre. As formas que podem ser utilizadas para controle de carga são as seguintes:

- Por intermédio de amostragem e análises de laboratório;
- Com o uso de analisadores em linha;
- Através da aplicação de inferências (soft sensors) ou sensores virtuais.

O uso de inferências permite, com baixo custo, estimar as características da carga e assim permitir com que a unidade atinja os objetivos preestabelecidos pela programação de produção; além disso, mesmo com a existência de análises de laboratório e analisadores em linha, o uso de sensores virtuais ainda é importante, pois o atraso na obtenção dos resultados (delay) em ambos os métodos permite a estimação das propriedades mesmo em regime transiente. Por fim, a utilização de inferências conjugadas a sistemas de controle avançado possibilita a unidade a operar sempre de forma a maximizar o rendimento, reduzindo os custos e aumentando a margem de lucro da refinaria.

2. REVISÃO DE LITERATURA

Neste capítulo serão dadas bases teóricas para, primeiramente, nos localizarmos a respeito do desenvolvimento das especificações no diesel no mundo, entendermos o funcionamento de uma unidade de hidrotreatamento e as dificuldades inerentes da obtenção de um diesel ULSD e então introduzirmos as definições de sensores virtuais para na sequência realizarmos uma introdução às redes neurais às correlações lineares.

Com base nesta revisão bibliográfica espera-se:

- Mostrar as consequências decorrentes do hidrotreatamento de diesel contendo componentes refratários oriundos da família dos dibenzotiofenos;
- Mostrar os benefícios do uso de sensores virtuais para a inferência de propriedades não mensuráveis;
- Introduzir técnicas para o desenvolvimento de sensores virtuais, como redes neurais e correlações lineares.

2.1. EVOLUÇÃO DAS ESPECIFICAÇÕES DO DIESEL

De forma a possibilitar uma melhor visualização do problema, vamos primeiramente avaliar a evolução das especificações do diesel em quatro mercados consumidores: na Europa, nos EUA, na América Latina e no Brasil como forma de entender o motivo real de tais preocupações estarem somente agora presentes no Brasil, em virtude dos diferentes timings para a implementação das especificações ULSD aqui. Cabe citar que em certos países (como na Suécia) as especificações são ainda mais restritivas, o que gera uma demanda ainda maior dos processos de hidrorrefino para a especificação dos derivados.

2.1.1. Evolução das Especificações na UE

Na União Europeia, onde as especificações são desenvolvidas pela CEN, os padrões de normalização do diesel foram adotados desde 1993. Existem cerca de três diretivas para cobrir as especificações de todos os combustíveis que são utilizados na UE:

- EN 590 para o diesel;
- EN 228 para a gasolina;
- EN 589 para o GLP automotivo.

Para o diesel, além de diferentes especificações que visam contemplar variações no ponto de entupimento decorrente das diferentes regiões onde o produto é comercializado, existem algumas especificações que são mandatórias para todas as diferentes fases e estão relacionadas na Tabela 2-1 [5] relacionadas principalmente aos quesitos de enxofre e cetano:

TABELA 2-1 — EVOLUÇÃO DAS ESPECIFICAÇÕES DO DIESEL NA CE

Ano	Enxofre Máximo (mg/kg)	Número de Cetano (Mínimo)
Outubro de 1994	2000	49
Outubro de 1996	500	49
Janeiro de 2000	350	51
Janeiro de 2005	50 ⁽¹⁾	51
Janeiro de 2009	10	51

¹ Indica também que deverá estar disponível o diesel ULSD (com concentração abaixo de 10 mg/kg) no mercado consumidor.

2.1.2. Evolução das Especificações nos EUA

Nos EUA, as especificações ULSD foram propostas para o teor de enxofre no diesel comercializado desde outubro de 2006 (com exceção para regiões rurais do Alasca, e da Califórnia, cujas novas especificações estavam valendo desde setembro de 2006). As seguintes premissas foram estabelecidas:

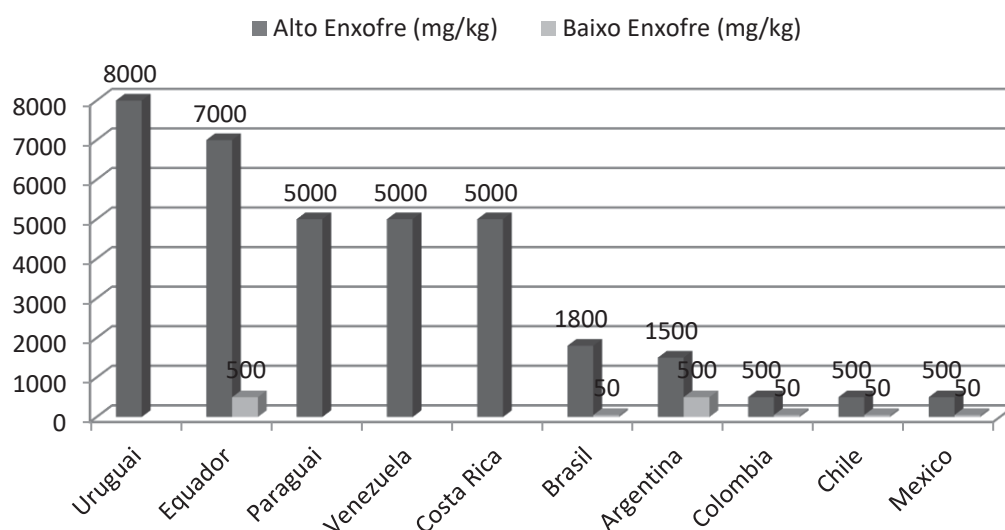
- Para veículos automotores, todo o diesel deve atender a especificação de 500 mg/kg de enxofre antes de 2006 e evoluir para a especificação ULSD após essa data (com 15 mg/kg de enxofre máximo);
- Para veículos off-road (tratores e colheitadeiras), o teor máximo de enxofre no diesel deverá ficar em 500 mg/kg a partir de 2007 devendo evoluir para diesel ULSD a partir de 2012;
- Existem ainda isenções em pequenas refinarias no diesel para locomotivas e no diesel marítimo que permitem a comercialização de diesel de 500 mg/kg de enxofre até 2014;
- Após dezembro de 2014 todo o diesel comercializado deverá ser ULSD;

De acordo com o EPA, estima-se que, com a entrada das novas especificações, que sejam reduzidas as emissões de óxidos de nitrogênio (NOx) em 2,6 milhões de toneladas por ano, e de material particulado em 110 mil toneladas pelo ano. O custo total estimado pelo governo americano para a implementação destas novas especificações deverá gerar um aumento de US\$ 0,013 a US\$ 0,066 por litro para o consumidor final, com um gasto de cerca de US\$ 8 bilhões por parte das refinarias para cumprir com as novas especificações [7].

2.1.3. Evolução das Especificações na América Latina

A Figura 2-1 [6] exemplifica em que estado se encontram as especificações de enxofre no diesel em diversos países da América Latina.

FIGURA 2-1 – TEORES DE ENXOFRE NO DIESEL NA AMÉRICA LATINA



Para a América Latina, a evolução da especificação do diesel ainda segue defasada das demais partes do mundo, com Chile, México e Colômbia em uma etapa mais avançada e os demais países bastante atrasados.

2.1.4. Evolução das Especificações no Brasil

No Brasil, em 1986 o CONAMA criou o PROCONVE com os seguintes objetivos [9]:

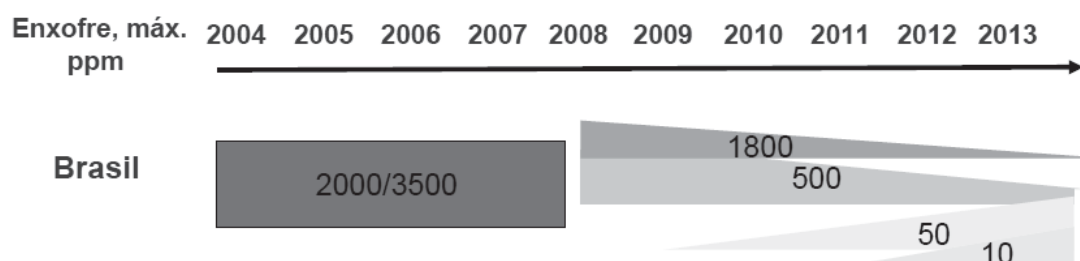
- Reduzir os níveis de emissão de poluentes por veículos automotores visando o atendimento aos Padrões de Qualidade do Ar;
- Promover o desenvolvimento tecnológico nacional, tanto na engenharia automobilística, como também em métodos e equipamentos para ensaios e medições de poluentes;
- Criar programas de inspeção e manutenção em veículos automotores em uso;
- Promover a conscientização da população em relação à questão da poluição do ar por veículos automotores;
- Estabelecer condições de avaliação dos resultados alcançados;

- Promover a melhoria das características técnicas dos combustíveis líquidos, postos à disposição da frota nacional de veículos automotores, visando a redução de emissões poluidoras.

No entanto, as especificações dos combustíveis não estão a cargo do CONAMA, mas sim da ANP. No cenário atual, o acordo atual firmado através de um Termo de Ajustamento de Conduta, o Ministério Público Federal, os refinadores, das montadoras e outros designaram o seguinte cenário para desenvolvimento das especificações no Brasil:

- O diesel passou a partir de janeiro de 2008 de duas mil partes por milhão (ppm) de enxofre para 1800 partes por milhão;
- A partir de janeiro de 2014, todo o diesel com 1800 ppm será substituído pelo diesel com 500 ppm de enxofre;
- Em janeiro de 2009 passou a ser obrigatório a produção de diesel com 50 ppm de enxofre para frotas cativas de ônibus urbanos.

FIGURA 2-2 – EVOLUÇÃO DA QUALIDADE DO DIESEL NO BRASIL



Com isso, o país terá uma fase de transição relativamente larga, com um decréscimo relativo do diesel com 1800 mg/kg de enxofre com substituição parcial pelo diesel com 500 mg/kg e posteriormente pela entrada do diesel com 50 mg/kg.

Esta fase de transição deverá terminar até 2014, com a manutenção de diesel com 50 e 10 mg/kg de enxofre para veículos automotores e possivelmente a manutenção de uma parcela de diesel com 1800 mg/kg de enxofre para máquinas agrícolas e uso marítimo.

2.2. UNIDADE DE HIDROTRATAMENTO

O hidrotratamento é um processo que visa, com o uso de hidrogênio, remover os heteroátomos das correntes produzidas no processo de destilação a fim de especificá-las em algumas características, como teor de enxofre e número de cetano, por exemplo. Apesar do processo já existir há muito tempo, só ganhou importância a partir da entrada de restrições ambientais para a produção de combustíveis.

É inegável o crescimento no Brasil e no mundo dos processos de hidrorrefino por conta da evolução das especificações dos combustíveis ao longo dos anos causadas pelo aumento das restrições ambientais e também da evolução das tecnologias dos motores. Tanto para o diesel como para a gasolina as restrições de enxofre, qualidade de ignição e composição química (principalmente aquelas relacionadas ao teor de aromáticos) vem evoluindo constantemente, conforme foi dito na seção anterior.

Para elucidar melhor a necessidade e a importância dos processos de hidrotratamento, vejamos o esquema de refino mostrado na FIGURA 2-3, onde se nota claramente que todas as correntes que são destinadas principalmente ao diesel e ao querosene devem ser hidrotratadas para atendimento das especificações. Desta forma, o uso de esquemas de refino chamados “convencionais” em um passado próximo (com destilação e FCC) impossibilita a produção de diesel ULSD devido aos valores de enxofre, nitrogênio e densidade que estes derivados possuem quando não sofrem hidrotratamento.

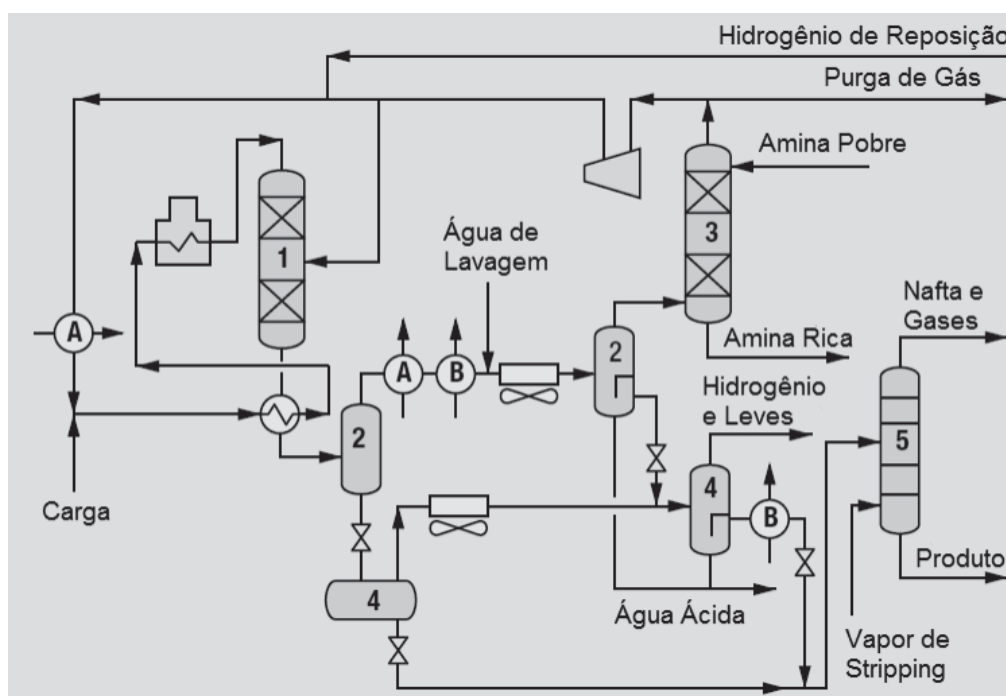
2.2.1. Descrição Geral de um Processo de HDT de Diesel

Trataremos a partir de agora de descrever as principais seções de uma unidade típica de HDT de diesel operando em condições subcríticas. Em geral, uma unidade de hidrotratamento pode ser subdividida em três seções distintas:

- Seção de condicionamento da carga: é onde a carga é preparada para a entrada do reator com base nas condições de recebimento;
- Seção de reação: é a seção onde ocorre o aquecimento, a reação e a separação dos componentes reagidos e não reagidos;
- Seção de polimento: é a etapa onde são removidos os contaminantes do produto hidrotratado (H_2S , água) e onde a carga é fracionada para enquadramento das propriedades finais de destilação.

Um fluxograma típico de uma unidade de hidrotratamento de alta severidade está na FIGURA 2-4 [1], embora possa existir variações significativas dependendo principalmente da carga que estará sendo tratada.

FIGURA 2-4 – FLUXOGRAMA DE PROCESSO DE UMA UNIDADE DE HIDROTRATAMENTO



A carga, depois de ser filtrada, pré-aquecida e desoxigenada na seção de condicionamento, entra na seção de reação sendo misturada com hidrogênio pré-aquecido (pelo trocador A) e seguindo para trocadores de calor que recebem carga térmica da saída do reator. O complemento da carga térmica é realizado através de um forno de processo, que eleva a mistura hidrogênio/hidrocarboneto à temperatura de entrada necessária para a ocorrência das reações de hidrotratamento.

O passo seguinte é o reator (1) propriamente dito. Nesta etapa, ocorrem as reações de hidrogenação de olefinas, de enxofre e nitrogênio, a saturação de aromáticos e as reações de hidrocrackeamento. A extensão de cada uma das reações é dependente das condições da carga e da severidade do reator. Entende-se por severidade um conjunto de três parâmetros distintos, a saber:

- Velocidade espacial (LSHV), que é uma medida do tempo de residência calculada conforme a Equação 2-1, onde LSHV é a velocidade espacial, Q é a vazão volumétrica de carga e V_{cat} é o volume de catalisador contido no(s) reator(es), todos em unidades adequadas; logo, quanto menor a velocidade espacial, maior será o tempo de residência e teoricamente maior a severidade para reações não limitadas termodinamicamente;

$$LSHV = \frac{Q}{V_{cat}} \quad \text{Equação 2-1}$$

- Pressão parcial ($P_{p_{H_2}}$), que é o produto entre a pressão de saída do reator (P) e a concentração de hidrogênio (y_{H_2}) conforme Equação 2-2; logo, quanto maior a pressão parcial, maior a concentração de hidrogênio e consequentemente maior será a severidade do sistema de reação;

$$P_{p_{H_2}} = P \cdot y_{H_2} \quad \text{Equação 2-2}$$

- WABT, que é uma medida de temperatura ponderada do leito; a expressão que define o cálculo do WABT do leito está na Equação 2-3:

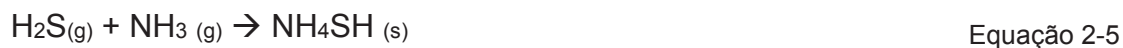
$$WABT = T_{entrada} + \frac{2}{3} \cdot \Delta T$$
Equação 2-3

Onde $T_{entrada}$ corresponde à média das temperaturas da entrada do leito e ΔT corresponde à diferença entre as médias das temperaturas da entrada e da saída do leito. No caso de múltiplos leitos ou múltiplos reatores, a expressão para o WABT total fica conforme a Equação 2-4:

$$WABT = \sum_{i=1}^n WABT_i \cdot V_i$$
Equação 2-4

Onde $WABT_i$ corresponde ao WABT calculado de cada leito / reator através da Equação 2-3 e V_i corresponde à fração volumétrica de catalisador ativo de cada leito.

Após a passagem da mistura reacional pelo(s) reator(es), sobra uma mistura de hidrocarbonetos que foram hidrotratados, amônia, sulfeto de hidrogênio e hidrogênio não reagido, além de hidrocarbonetos leves, como metano, etano e superiores. Estes serão resfriados cedendo calor para a carga e enviados para um vaso separador de alta pressão a quente (HHPS, 2 à esquerda). No topo deste vaso saem o hidrogênio não reagido, os gases gerados no processo (NH_3 , H_2S) e frações de hidrocarbonetos leves. Estes são resfriados, cedendo calor para o hidrogênio que entra na carga (A) e para a o produto que sai do vaso de baixa pressão à frio (B) (CLPS, 4 à esquerda) e recebem uma injeção de água de lavagem visando evitar a formação de sais de bissulfito de amônio (NH_4SH), que são gerados pela seguinte reação:



Essa mistura trifásica (hidrogênio, hidrocarbonetos leves condensados e hidrogênio) é novamente resfriada e enviada para um vaso separador de alta pressão a frio (CHPS, 2 à direita), onde são separadas três correntes:

- Uma corrente gasosa rica em hidrogênio e H_2S , que sai do topo do vaso e será primeiramente direcionada a uma torre de absorção com amina (DEA) para retirada do H_2S para então ser reciclada novamente para o processo através de um compressor de reciclo;
- Uma corrente aquosa denominada água ácida (sour water) que será direcionada para tanques ou para tratamento em unidades de água ácida;
- Uma fase hidrocarboneto que será direcionada para o vaso separador de baixa pressão à frio (CLPS, 4 a direita) para incorporação como produto hidrotratado.

O fundo do HHPS (2 à esquerda) contém majoritariamente o hidrocarboneto hidrotratado com H_2S , hidrogênio e hidrocarbonetos leves solubilizados. Para adequar esta corrente, esta é enviada para um vaso separador de baixa pressão à quente (HLPS, 4 a esquerda), e através do abaixamento da pressão, o hidrogênio remanescente sai pelo topo juntamente com o H_2S e parte do hidrocarboneto leve.

A corrente de topo é então resfriada, misturada com a fase hidrocarboneto do CHPS (2 à direita) e enviada para o CLPS (4 à direita), onde acontece a separação final do hidrogênio e o restante dos gases dissolvidos (incluindo algum hidrocarboneto leve que possa ter se formado por hidrocraqueamento), que saem no topo para serem então tratados e enviados para gás combustível ou para reaproveitamento em outras unidades. O fundo do HLPS (4 a esquerda) se mistura com o fundo do CLPS (4 a direita) e é direcionado a seção de polimento.

Dependendo da unidade e da pressão de operação do sistema de reação, é possível que a unidade tenha somente um único vaso de baixa pressão (CLPS), dois (CHPS e CLPS) ou três (HHPS, CHPS e CLPS), tudo dependente de uma avaliação econômica de investimento versus preço do hidrogênio perdido.

Na seção de polimento, a primeira etapa a ser realizada é a remoção de H_2S na stripper (5), onde o hidrocarboneto com traços de H_2S é retificado com o uso de vapor d'água, com o vapor entrando na seção de esgotamento da torre através do líquido que passa através de pratos. No topo, geralmente são geradas duas correntes:

- O gás ácido, que é uma corrente rica em H_2S e metano e que será enviada para uma unidade de absorção com aminas para separação do H_2S ; o gás gerado geralmente é direcionado para uso como gás combustível e o H_2S é direcionado para unidades de recuperação de enxofre (UREs);
- A nafta selvagem, que é um produto relativamente corrosivo que pode ser direcionado para outra unidade (destilação, craqueamento) para fracionamento ou tratamento.

O produto de fundo, agora isento de H_2S , pode ser então enviado para tanque, pode ser separado em uma torre fracionadora ou simplesmente secado através da passagem em vasos de sal ou com o uso de torres de vácuo.

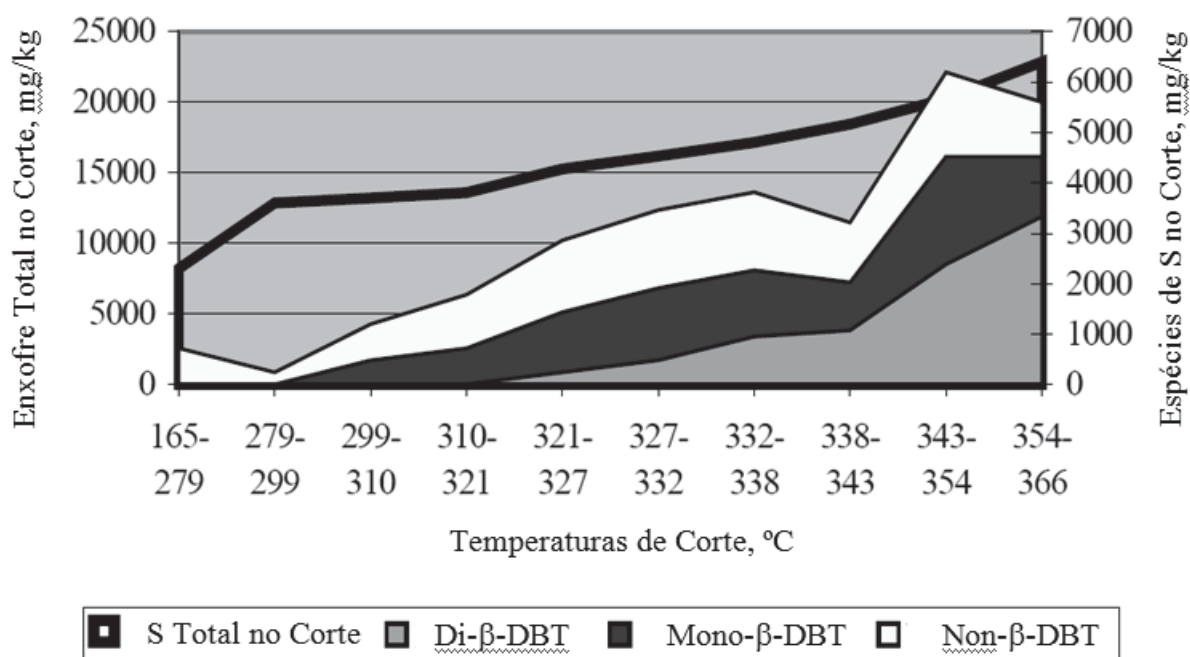
2.3. DIFICULDADES DA OBTENÇÃO DO DIESEL ULSD

A principal dificuldade de obtenção do diesel ULSD se deve à ao grau de dificuldade necessário para remoção de determinadas espécies de enxofre do meio. Pelo fato do diesel ser feito de uma série de correntes oriundas de diversas fontes (destilação, craqueamento, coqueamento retardado), é normal que cada carga contenha milhares de moléculas distintas, fazendo com que cada uma apresente mecanismos distintos de dessulfurização.

Em linhas gerais, o LCO oriundo do FCC é difícil de processar devido ao seu alto teor de enxofre, nitrogênio e também devido à sua elevada aromaticidade, enquanto as cargas de destilação direta são as mais fáceis de serem processadas.

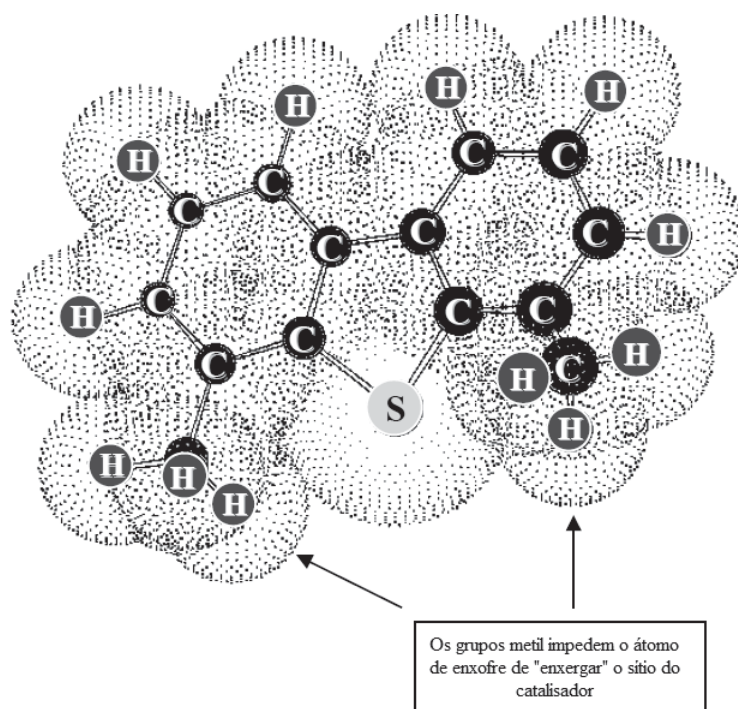
Em todos os casos, quanto maior o ponto final, também será a complexidade dos heteroátomos. As frações de diesel contêm não somente quantidades elevadas de enxofre, mas também elevadas quantidades de moléculas de enxofre difíceis de hidrodesulfurizar, como podemos ver na FIGURA 2-5 [10].

FIGURA 2-5 – CURVA DE ESPECIAÇÃO DE ENXOFRE NO ÁRABE MÉDIO



A dificuldade de remoção do enxofre do LCO se deve a presença de compostos da família dos tiofenos, particularmente os dibenzotiofenos e superiores. A refratariedade destes compostos depende do tipo de radicais alquila que estão conjugados na molécula. Quando os radicais alquila estão adicionados a posições não-beta, a molécula é moderadamente difícil de ser dessulfurizada. Se o grupo alquila for adicionado para qualquer um dos, ou ambos os sites beta (4,6), a dificuldade aumenta significativamente, pois o enxofre se torna estericamente impedido de alcançar o sítio do catalisador [10].

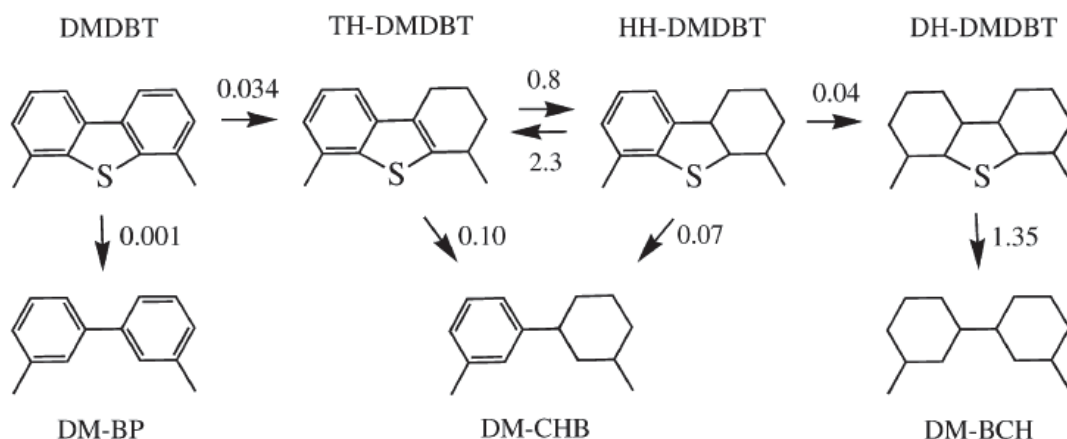
FIGURA 2-6 – ESTRUTURA ATÔMICA DO 4,6-DIMETIL-BIBENZOTIOFENO



Atualmente a indústria vem se valendo de diversas metodologias de projeto e retrofitting de unidades para a especificação de diesel ULSD (com teores de enxofre entre 10 a 50 mg/kg), através das quais podemos citar:

- *Através do uso pressões parciais mais altas:* com isso, entram em cena os mecanismos de hidrogenação direta que permitem que os grupos aromáticos sejam saturados, reduzindo o efeito do impedimento estérico e gerando como consequência um aumento da taxa de reação para a remoção de enxofre para estes compostos, uma vez que a rota de desaromatização é mais rápida que a de dessulfurização direta (vide FIGURA 2-7) [12]. Entretanto, a saturação dos anéis aromáticos é dependente fortemente da pressão parcial de hidrogênio no reator [13], e excetuando-se casos onde a fonte de hidrogênio seja impura ou onde o gás de reciclo contenha elevado teor de contaminantes, esta alternativa implica em alteração da pressão do sistema, o que pode impraticável em unidades existentes dado as limitações de espaço e ao investimento necessário para tal mudança; além disso, a desaromatização é uma reação que é termodinamicamente favorecida a temperaturas mais baixas, o que acaba por sua vez gerando a necessidade de aumento de volume reacional para compensar a perda da velocidade das reações de hidrodessulfurização.

FIGURA 2-7 – CONSTANTES DE PSEUDO-PRIMEIRA ORDEM (EM $\text{MOL.G}^{-1}.\text{MIN}^{-1}$) DO SISTEMA DE DMDBT SOBRE $\text{MO/G-AL}_2\text{O}_3$ À 300° E 10 KPA DE H_2S [12]



- *Por intermédio da redução da velocidade espacial no interior do reator:* esta modificação causa o aumento do tempo de residência da mistura carga / hidrogênio no interior do reator, permitindo que os compostos mais refratários reajam. Entretanto, a não ser que a carga da unidade seja reduzida (e conseqüentemente a produção), resta como solução aumentar o volume de catalisador para conseguir manipular esta variável. Aumentar o volume de catalisador implica, no entanto, a usualmente ter que construir outro reator, o que demandará espaço e investimentos adicionais, além de aumentar os custos de recompressão devido ao aumento de perda de carga pelo uso de leitos adicionais e ainda aumentar a quantidade de resíduos produzidos a cada parada para troca do inventário de catalisador. Estima-se que para reduzir o teor de enxofre de 500 mg/kg para 15 mg/kg, uma unidade convencional precisaria de um aumento de 2 a 3 vezes o seu volume de catalisador, e para atingir níveis de 0,1 mg/kg (o diesel “sulfur free”) seria necessário um aumento de 7 vezes o volume de catalisador [14];

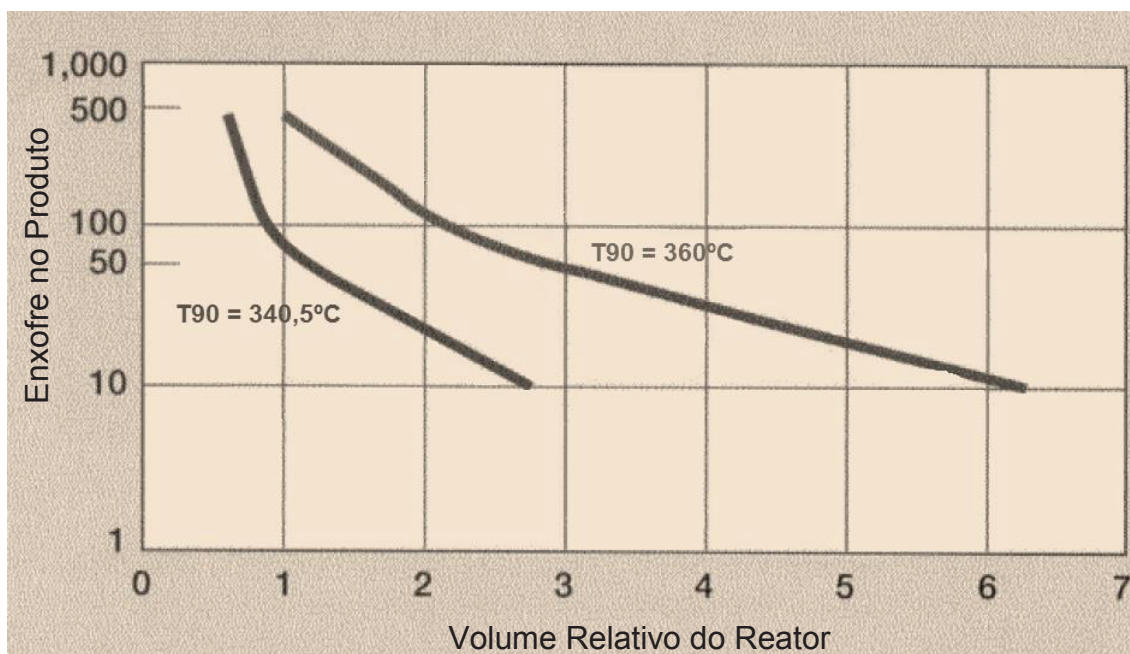
- *Pelo aumento da temperatura de reação*: esta alternativa pode levar a um aumento de conversão, mas também a um aumento da taxa de desativação do catalisador. Este, por conseguinte, podem levar a um aumento dos custos tanto por lucro cessante na troca do catalisador, como também pelos custos do próprio catalisador. Em projetos da UOP², um aumento de 11,1°C no WABT global reduziu o enxofre de 140 mg/kg para 120 mg/kg [14] [15];
- *Pela troca do catalisador do catalisador por outro de tecnologia mais recente, pela substituição dos internos do reator, pelo aumento da relação hidrogênio / óleo e pelo uso de carregamento denso (que permitem um acréscimo de 15% a mais de massa de catalisador em um mesmo leito catalítico)*: estas alternativas permitem aumentar a remoção de enxofre do processo e geralmente são aplicáveis em contextos usuais, mas geralmente não são por si só suficientes para a transformação de uma unidade convencional em uma unidade que produza ULSD;
- *Pelo controle da qualidade da carga*: a melhora da qualidade da carga pode ter um grande efeito na qualidade do produto. Em geral, cargas mais difíceis de serem tratadas, como o LCO, gasóleos de coque e diesel pesado devem ser tratados em unidades de alta pressão se possível. O controle do ponto de ebulição é usualmente empregado para remover as espécies refratárias e permitir o tratamento de forma muito mais fácil em unidades existentes.

2.3.1. Importância do Controle do Corte da Carga Processada

Para exemplificar, suponha que uma unidade hoje opere com uma carga com 90% vaporizados de 360°C e fazendo diesel com 500 mg/kg. Com a alteração do ponto final para 340,5°C, o teor de enxofre pode ser reduzido para níveis de 50 a 100 mg/kg conforme mostrado na FIGURA 2-8.

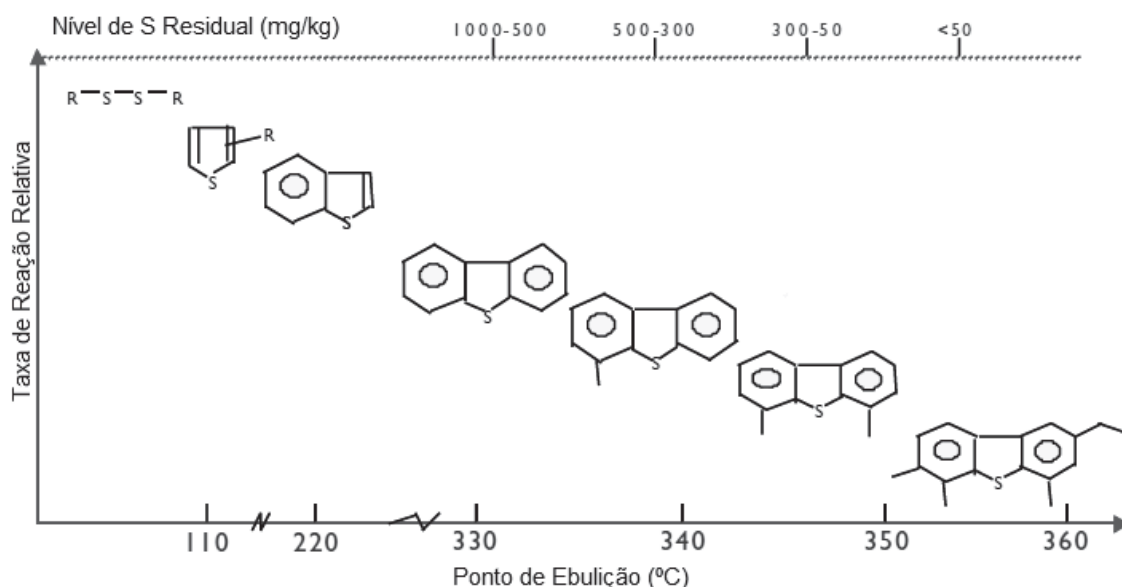
² Empresa de desenvolvimento e projeto de unidades de refino de petróleo e gás, unidades petroquímicas e outras. A sigla significa em inglês *Universal Petroleum Products* (Produtos Universais de Petróleo).

FIGURA 2-8 – VOLUME RELATIVO DO REATOR EM FUNÇÃO DO PONTO FINAL [16]



A razão principal de tamanha melhora se deve ao fato de que, a partir do momento que o ponto final da carga aumenta, a concentração de compostos sulfurados que apresentam impedimento estérico também aumenta. Além disso, o controle do ponto final também auxilia na remoção de espécies nitrogenadas como a acrilidina que competem com os mesmos sítios que as moléculas de enxofre [17], conforme FIGURA 2-9, e com isso se tem um aumento da atividade de hidrodesulfurização em 60 a 70% ou uma redução na temperatura de início da campanha de 13 a 16 °C. A principal consequência é a perda de médios para óleo combustível, gerando um aumento de cerca de 10 a 20% que deverá ser avaliado economicamente frente à economia de capital que será obtida pela não-modificação da unidade.

FIGURA 2-9 – TAXAS DE REAÇÃO DE DIVERSOS COMPOSTOS COM DIFERENTES PONTOS DE EBULIÇÃO



Choi, Korai e Mochida [18] realizaram de experimentos de hidrotratamento visando avaliar as formas de obter a dessulfurização do LCO com diferentes cortes utilizando catalisadores à base de cobalto-molibdênio (CoMo) e níquel-molibdênio (NiMo), e chegaram à conclusão que é possível sim obter diesel ULSD utilizando-se do corte do LCO, em valores próximos a 5 ppm com pressões parciais de hidrogênio de 50 kgf/cm². Entretanto, o artigo menciona também os efeitos de inibição do nitrogênio em reações de HDS, o que particularmente deve ser levado em conta no caso de cortes oriundos de petróleos brasileiros, que possuem elevado teor de nitrogenados quando comparados com os demais petróleos existentes no mercado.

2.4. SENSORES VIRTUAIS

Trataremos agora de elucidar alguns aspectos a respeito do uso de sensores virtuais, que nada mais são que ferramentas passíveis de utilização em muitas aplicações industriais, e que servem para diferentes propósitos, como reserva de sistemas de medição, para análises do tipo *what-if*, como controle preditivo em tempo real, para validação de sensores reais e como ferramenta para elaboração de estratégias de falhas [20].

Nesta etapa será dada uma rápida explanação a respeito dos sensores virtuais, será realizada uma comparação entre metodologias de controle com sensores virtuais e com outras técnicas, será dada uma breve explanação entre as possibilidades de desenvolvimento de sensores virtuais e serão colocadas algumas diretrizes a respeito do melhor uso dos sensores virtuais para a obtenção de resultados mais fidedignos.

2.4.1. Sensores e Instrumentos Virtuais

Segundo Tham et al. [21], o problema de controlar saídas do processo que não são frequentemente medidas tem sido estudado há um longo tempo e publicações nesta área datam do início dos anos 70, e essencialmente as soluções incorrem em duas metodologias:

- Na formulação de algoritmos especiais de controle para controlar as saídas que não são medidas, que, no entanto, foram desenvolvidos somente em modelos de primeira ordem e sem resultados comparativos;
- No uso de informação provida por outras variáveis estimadas como forma de fornecer uma estimação para a variável controlada.

Neste segundo caso é que reinam os sensores virtuais (do inglês *soft-sensors*) e os instrumentos virtuais, que são na verdade ferramentas que visam estimar ou inferir o valor de uma variável que não pode ser medida em tempo real através de cálculos baseados em outras medidas disponíveis na planta. Este tipo de controle é particularmente interessante em industriais químicas e petroquímicas, onde a variável controlada é oriunda da composição química e conseqüentemente passa essa a ser o grande atraso na obtenção da resposta por conta do *delay* (atraso) oriundo dos analisadores do laboratório [22].

2.4.2. Comparações entre Metodologias de Controle

Um dos principais questionamentos realizados nas industriais atualmente é: qual é a melhor técnica para manipular uma variável não medida? Conceitualmente falando, o mercado atual possui cerca de três metodologias distintas consagradas para controle de processo, que são: as análises laboratoriais, os analisadores em linha e os sensores virtuais.

Em relação às análises laboratoriais, a principal vantagem é o custo relativamente baixo de implementação, pois se utiliza o próprio corpo industrial para a realização deste controle; no entanto, o principal problema desta técnica é o atraso entre a leitura e a resposta por parte do operador, que faz com que o controle fique “cego” no período entre a retirada da amostra, a análise e a manipulação das variáveis controladas; além disso, para a obtenção de sucesso desta metodologia, deverão ocorrer vários eventos bem sucedidos, tais como:

- O processo tem que estar em estado estacionário, pois caso se encontre em regime transiente, a amostra do produto a ser analisada não estará sendo indicativa do estado em que a planta se encontrará após o fim do distúrbio;
- É necessária a execução de várias tarefas por parte do operador de campo para obtenção de amostra representativa (ambientação, acondicionamento, transporte) e que conseqüentemente podem gerar fontes de erro para a obtenção dos resultados;
- A análise deverá ser bem-sucedida, o que dependerá principalmente dos equipamentos, do treinamento do analista e da calibração dos equipamentos;
- Deverão ser respeitados os atrasos de amostragem devido aos inventários das linhas e pulmões existentes no processo.

Em relação aos analisadores em linha, estes têm como principal vantagem a possibilidade de fornecer resultados com menor escala de tempo que uma análise laboratorial e não necessitar de intervenção do operador para a obtenção de uma amostra do processo; entretanto, ainda pesam em sua seleção principalmente os custos de implementação e os custos de manutenção, que são bastante elevados.

Já o uso de sensores virtuais representa uma vantagem competitiva bastante interessante, possuindo uma gama de atrativos [20]:

- Eles representam uma alternativa de baixo custo à equipamentos analíticos de custo de manutenção e instalação elevados, permitindo a criação de redes de monitoramento;
- Podem operar em paralelo com analisadores em linha, fornecendo informações importantes para detecção de falhas dos analisadores e permitindo assim uma maior confiabilidade no controle de uma determinada variável de processo; Ansari e Al-Otabi [23] descrevem um sensor virtual de destilação ASTM que possui o bias atualizado com o uso dos resultados de laboratório e do analisador em linha, o que permite garantir que, no caso ocorram desvios de uma das formas de medição, que sejam tomadas as medidas necessárias para correção;
- Eles podem ser facilmente implementados no hardware existente e recalibrados quando os parâmetros do sistema mudam;
- Permitem estimação em tempo real dos dados, evitando atrasos introduzidos por sensores com baixo tempo de resposta (como cromatógrafos) e aumentando com isso a performance dos sistemas de controle.

No entanto, Liu et al. [24] comenta a respeito de alguns desafios que cerceiam o desenvolvimento de sensores virtuais:

- Dados com qualidade não estão uniformemente disponíveis, pois eventos errôneos podem ocorrer durante o processo de amostragem bem como em analisadores em linha;
- A possibilidade de termos diferentes medidas entre o laboratório e o analisador em linha, por conta de diferentes tempos de residência para cada medida;
- As mudanças de condições de processo são comuns e necessárias para atender as restrições de mercado e logísticas;
- O processo possui centena de variáveis, e uma análise precisa ser feita para identificar quais as mais importantes para o desenvolvimento do sensor.

Logo, verifica-se que não existe uma única metodologia que atenda aos quesitos de velocidade, custo e retorno de investimento, e sendo assim cada organização trata este assunto de forma distinta a depender da realidade e do contexto de mercado que está inserida.

2.4.3. Métodos de Desenvolvimento de Inferências

A literatura não apresenta uma uniformidade nos métodos possíveis de desenvolvimento de inferências (ou sensores virtuais), e existem várias correntes que defendem diferentes técnicas como sendo a melhor, cada uma com um ponto de vista diferente. Shah e Goel [25] subdividem os métodos adotados para desenvolvimento de sensores virtuais em três grupos:

- *Princípios fundamentais*: este é o método mais rigoroso do ponto de vista de modelagem; as propriedades são estimadas a partir de dados termodinâmicos com os parâmetros de processo sendo coletados a partir de dados de planta; para a utilização deste método, torna-se necessário uma grande quantidade de dados termodinâmicos e uma modelagem mais rigorosa do problema, o que nem sempre pode ser fácil do ponto de vista matemático dada a complexidade do sistema em questão; ainda, caso seja possível seu equacionamento, este pode desencadear um tempo de resolução computacional elevado e uma precisão duvidosa devido às hipóteses utilizadas para a criação do modelo, o que limita sua utilização como modelo de controle;
- *Simulação*: consiste em simular a unidade com o uso de softwares específicos e a partir das rodadas obtidas seguir com a criação de modelos que seriam utilizados para a obtenção dos sensores virtuais. O risco, segundo o autor, é do fato que a simulação pode não ser exatamente o “espelho” da operação da planta, o que poderia levar a resultados errôneos; além disso, os custos de pacotes para simulação são geralmente elevados;
- *Métodos Estatísticos*: consiste no uso de dados de laboratório cruzando com softwares proprietários para o cálculo de correlações ou mesmo de planilhas eletrônicas para obtenção dos modelos.

Shah e Goel [25] também fazem uma comparação entre os diferentes métodos de criação de sensores virtuais conforme a TABELA 2-2. Os pontos avaliados foram custo, tempo, grau de competências técnica dos responsáveis pela criação dos modelos e facilidade de mudança no caso de alterações nas condições do processo / equipamento.

TABELA 2-2 – COMPARAÇÃO DE DIVERSOS MÉTODOS

Método	Princípios Fundamentais	Simulação	Estatístico
Custo	Médio	Alto	Baixo
Tempo	Alto	Médio	Baixo
Competência Técnica	Muito alta	Alta	Baixa
Facilidade de Mudança	Muito alta	Média	Alta

Friedman [26] não apresenta uma classificação, mas questiona a respeito da classificação acima, clamando que o uso de inferências através de princípios fundamentais leva vantagem em relação a outros métodos, aos quais, entre outros pontos, ele comenta:

- Os usos de modelos criados através de princípios fundamentais não teriam demanda computacional grande, pois empregam conceitos de engenharia química e de processo, diferentemente das simulações;
- Os modelos estatísticos, por serem baseados em regras gaussianas, necessitam de entradas independentes, o que não acontecem em uma unidade real porque as medidas estão conectadas através de balanços de massa, de energia e equilíbrio;
- Os modelos estatísticos precisam identificar um grande número de coeficientes, e, além disso, quanto melhor a calibração do modelo, pior a predição do mesmo;
- Os modelos baseados em princípios fundamentais permitem criar formas de verificar erros nos instrumentos; já os baseados em regras estatísticas se forem modelados com entradas erradas não funcionarão.

Por fim, Fortuna et al. [20] divide também os métodos para a criação em três: a modelagem mecanicista (modelagem física), a estatística multivariada e a modelagem com inteligência artificial, com o uso de redes neurais, lógica fuzzy e métodos híbridos. O autor comenta ainda que esta classificação não possui a intenção de ser rígida, e que metodologias típicas de um deles são usualmente melhoradas com o uso de outras técnicas.

2.4.4. Verificações Importantes para a Implementação de Inferências

De acordo com King [27], existem cerca de 14 regras que devem ser seguidas para a obtenção de uma boa inferência que possa ser implementada em um sistema de controle, nas quais serão citadas as mais importantes a seguir:

- *Não utilizar analisadores em linha para estratégia de controle* devido ao tempo de resposta mais; preferencialmente, utilizar as inferências, pois elas, além de mais rápidas, permitem a análise do processo em regime transiente e possuem uma taxa de falhas menor que um analisador em linha convencional;
- *Não utilizar correção automática de bias na inferência*, pois o processo de amostragem / análise laboratorial pode ser uma fonte de erro, o que pode interferir nos resultados obtidos através do sensor virtual; o autor recomenda que a correção seja feita somente se o erro for pertinente e sustentável, causado por mudanças ou degradações nas condições de processo.
- *Não utilizar gráficos de linhas para verificar a precisão da inferência*, pois conforme podemos ver na FIGURA 2-10 aparentemente a propriedade inferida tem boa correlação com a propriedade medida ao longo do tempo. Entretanto, se utilizarmos o mesmo conjunto de dados e o plotarmos em um gráfico de dispersão (conforme FIGURA 2-11) nota-se que a correlação do modelo com os resultados do processo cai assustadoramente, podendo inclusive causar problemas para a especificação do produto final ou a geração de sobre especificação; Friedman [39], por outro lado, diz que esta comparação não é possível devido aos atrasos entre a análise e a inferência.

FIGURA 2-10 – COMPARAÇÃO DE PROPRIEDADES UTILIZANDO GRÁFICOS DE LINHAS

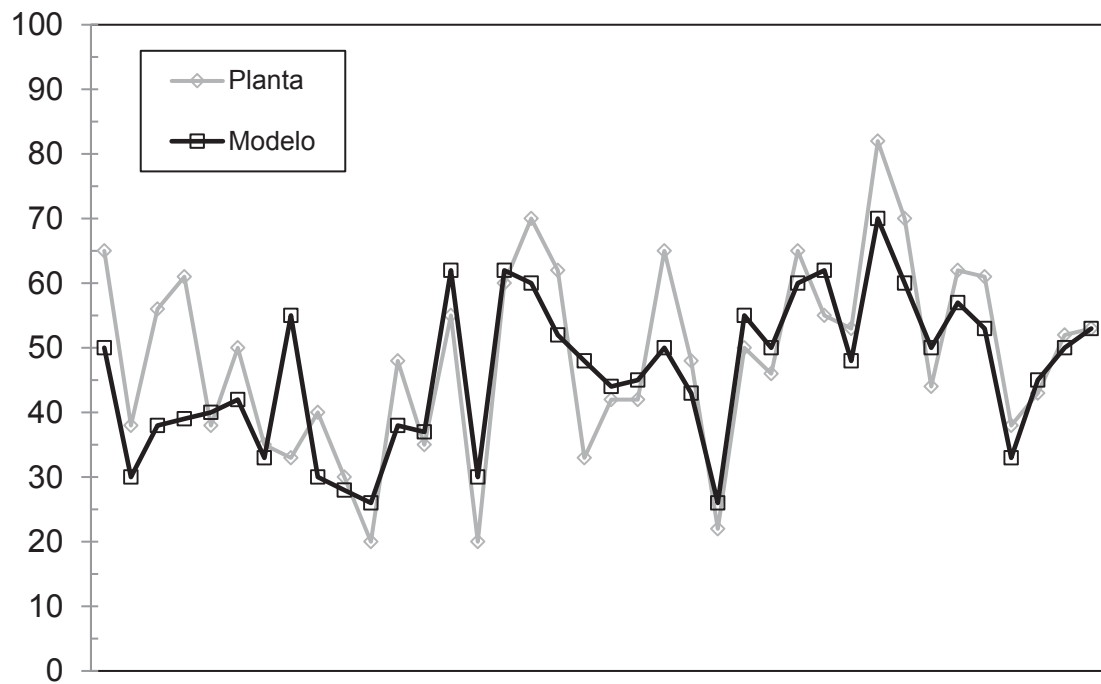
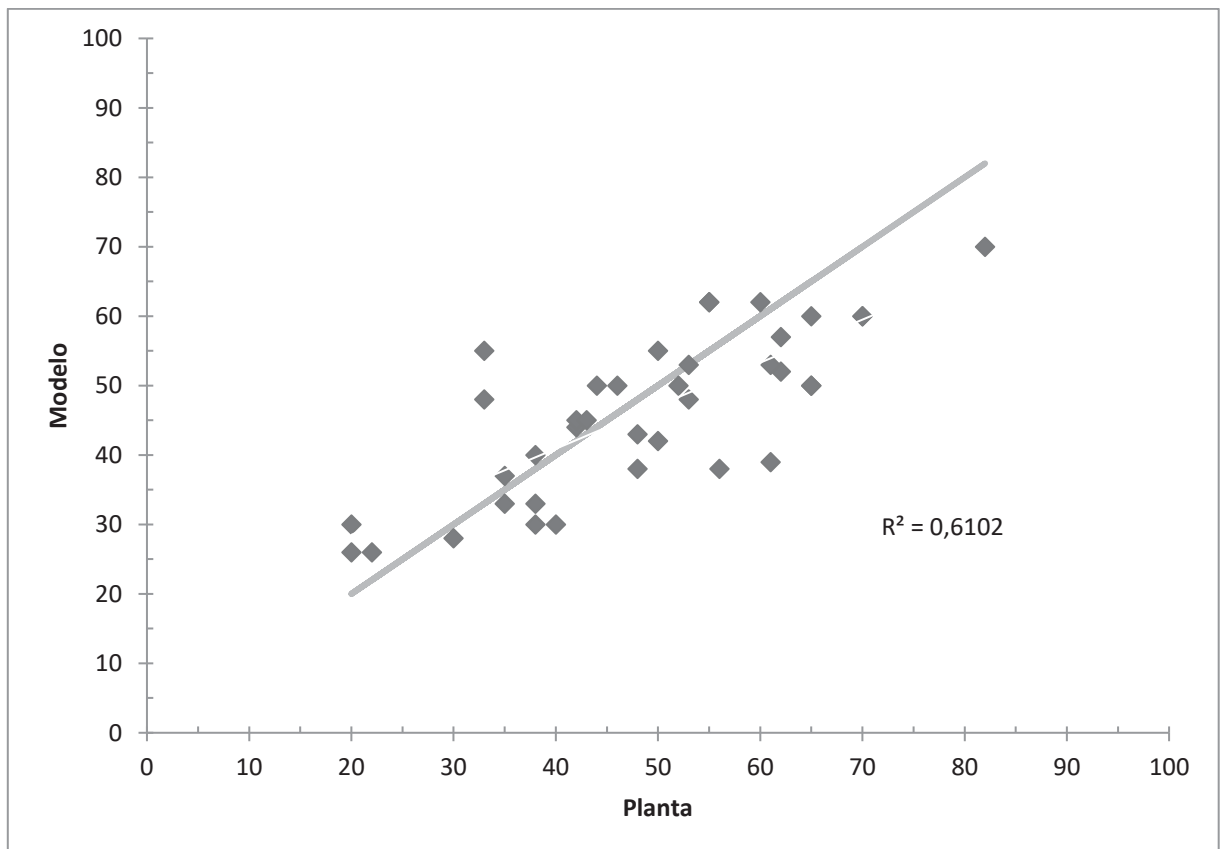


FIGURA 2-11 – COMPARAÇÃO DE PROPRIEDADES USANDO GRÁFICOS DE DISPERSÃO



- *Medir a efetividade da inferência:* é essencial comparar a precisão da inferência com a variabilidade da propriedade que está sendo inferida, pois medidas sozinhas como coeficientes de correlação e erros padrão não possuem a habilidade de fazer isso; desta forma, o autor recomenda o uso do parâmetro dado pela Equação 2-6:

$$Parâmetro = \frac{1 - \sigma_{erro}^2}{\sigma_{propriedade}^2} \quad \text{Equação 2-6}$$

Onde σ_{erro}^2 é a variância do erro (inferência do erro versus laboratório) e $\sigma_{propriedade}^2$ é a variância da propriedade. Se estes parâmetros caírem abaixo de zero, a inferência poderá introduzir distúrbios no processo maiores que aqueles antes do comissionamento do sistema de controle.

- *Aplicar única e exclusivamente regressões sem conhecer o processo:* o conhecimento do processo é importante para evitar coincidências matemáticas que subsequentemente podem levar a excursões do processo, causando grandes danos à rentabilidade da planta;
- *Não se importar com a necessidade do uso de modelos semi-rigorosos:* o modelo semi-riguroso, apesar de necessitar de um menor número de entradas para sua calibração, são mais complexos e usualmente os gastos são maiores para a implementação e manutenção. Além disso, se não houver expertise suficiente para mantê-los, eles podem ser degradados para modelos caixa-preta dependentes de muitos parâmetros, e por isso pode torná-lo mais susceptível a falhas pois são mais instrumentos para manter e calibrar;
- *Monitorar o desempenho das inferências ao final da implementação:* como os equipamentos e instrumentos tendem a degradar, a tendência é que o desempenho da inferência tenda a cair, e por esse motivo as inferências devem ser monitoradas para que sejam ajustadas, evitando assim que o operador volte a controlar a variável da forma antiga;
- *Desenvolver as inferências somente com dados coletados durante testes em degrau da planta:* esta abordagem pode levar o modelo a não cobrir situações operacionais que não ocorreram durante o teste;

2.5. REDES NEURAIS

Uma rede neural (ou uma rede neural artificial) é um sistema de processamento de informação que possui certas características de desempenho em comum com as redes neurológicas biológicas. As redes neurais artificiais têm sido desenvolvidas como generalizações de modelos matemáticos de cognição humana ou biologia neural, baseado nas seguintes suposições:

- O processamento da informação ocorre em muitos elementos simples chamados neurônios;
- Os sinais são transmitidos entre os neurônios através de conexões;
- Cada conexão possui um peso associado, no qual, em uma rede neural típica, multiplica o sinal transmitido;
- Cada neurônio aplica uma função de ativação (usualmente não linear) para sua entrada da rede (que é a soma ponderada dos sinais de entrada) para determinar o sinal de saída.

Uma rede neural é caracterizada pelo seu padrão de conexões entre os neurônios (a arquitetura da rede), pelo método de determinação dos pesos das conexões (chamado de algoritmo de treino ou aprendizagem) e da sua função de ativação [29].

A aplicação de redes neurais nas indústrias de processo é atualmente bem estabelecida, sendo que a aplicação mais utilizada é a estimação de propriedades ou sensores virtuais. Mais recentemente, modelos de controle preditivo utilizando redes neurais estão emergindo do mercado [29].

O objetivo deste capítulo é mostrar um pouco a respeito da modelagem das estruturas básicas das redes, os neurônios, em seguida focar nas redes do tipo MLP e por fim identificar algumas premissas básicas para a boa utilização das redes neurais como ferramenta de processo.

2.5.1. Modelo de um Neurônio

O neurônio é uma unidade de processamento de informação constituído basicamente de três elementos principais [34]:

- *Um conjunto de sinapses ou elos de conexão com seus respectivos pesos* que fazem com que cada sinal de entrada seja multiplicado pelo seu peso sináptico;
- *Um somador* que faz a soma ponderada dos produtos entre as entradas das sinapses e seus respectivos pesos, constituindo assim uma combinação linear dos pesos;
- *Uma função de ativação*, que visa restringir a amplitude da saída do neurônio, geralmente entre o intervalo de [0,1] ou [-1,1].
- *Um bias* que tem o efeito de aumentar ou diminuir a entrada. Não existe uniformidade a respeito da notação do bias, sendo que em geral muitos autores expressam o valor do bias como um peso sináptico com uma entrada com valor unitário, e outros expressam como se fosse uma entrada na rede diretamente ao somador. Usaremos neste capítulo a notação de que o bias entra diretamente ao somador.

Em termos matemáticos, o neurônio k pode ser escrito da seguinte forma:

$$y_k = \varphi \left(\sum_{j=1}^n \omega_{kj} x_j + b_k \right)$$

Equação 2-7

Onde x_k correspondem aos sinais de entrada, ω_{kj} correspondem aos pesos sinápticos do neurônio k, b_k é o bias do neurônio, φ é uma função de ativação para o neurônio k e y_k é o sinal de saída do neurônio. A função de ativação que define a forma de saída do neurônio pode ser das seguintes formas, entre outras:

- *Função Identidade (ou função de Heaviside)*: a entrada é a mesma que a saída, conforme a Equação 2-8. A utilização desta função de transferência implica na criação de uma rede neural linear, cujos neurônios serão nada mais nada menos que uma combinação linear das entradas ponderadas pelos pesos sinápticos.

$$y_k = \left(\sum_{j=1}^n \omega_{kj} x_j + b_k \right) \quad \text{Equação 2-8}$$

- *Função Logística (ou função sigmóide)*: a entrada produz um sinal entre 0 e 1. Matematicamente esta função é descrita por intermédio da Equação 2-9.

$$\varphi \left(\sum_{j=1}^n \omega_{kj} x_j + b_k \right) = \left(1 + \exp \left(-d \cdot \left(\sum_{j=1}^n \omega_{kj} x_j + b_k \right) \right) \right)^{-1} \quad \text{Equação 2-9}$$

Onde h é o parâmetro de inclinação da função logística. Esse parâmetro serve para alterar a inclinação da curva logística, e quando tende ao infinito, a função tende a se transformar em uma função degrau.

- *Função Tangente Hiperbólica*: a entrada produz um sinal entre -1 e 1. Matematicamente a função é descrita através da Equação 2-10:

$$\varphi \left(\sum_{j=1}^n \omega_{kj} x_j + b_k \right) = \tanh \left(\sum_{j=1}^n \omega_{kj} x_j + b_k \right) \quad \text{Equação 2-10}$$

- *Função Exponencial*: É a própria função exponencial negativa, que fornecerá resultados entre $[0,1]$ para um domínio de entrada de $[0,\infty]$. A equação que descreve esta função de transferência está descrita conforme a Equação 2-11.

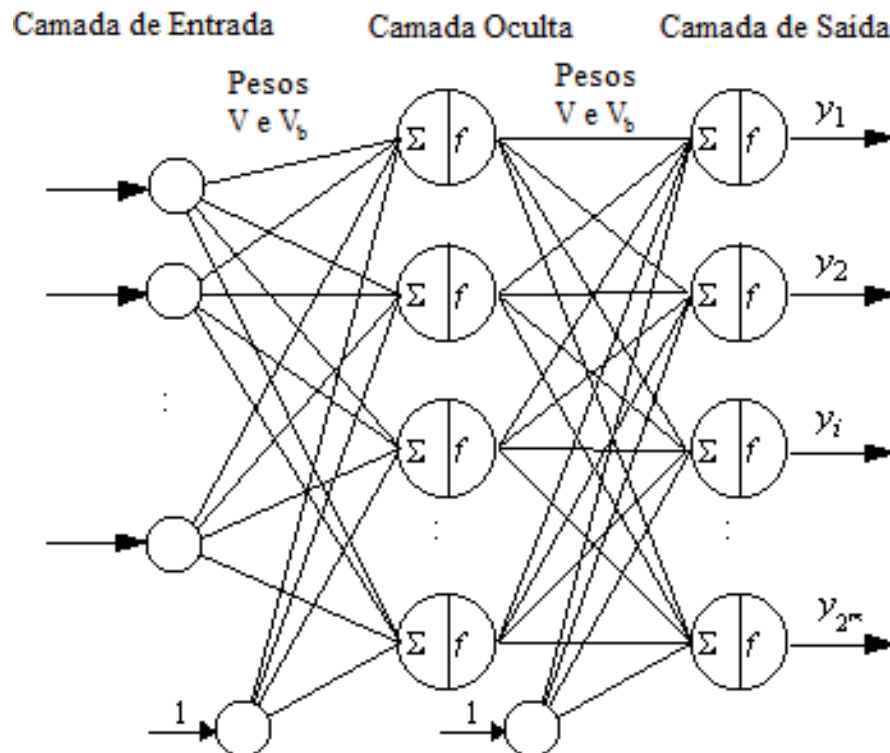
$$\varphi \left(\sum_{j=1}^n \omega_{kj} x_j + b_k \right) = \exp \left(-1 \cdot \left(\sum_{j=1}^n \omega_{kj} x_j + b_k \right) \right) \quad \text{Equação 2-11}$$

2.5.2. Redes MLP³

As redes MLP são classes de rede com uma camada sensorial ou camada de entrada que possui tantos nós de entrada quantos forem os sinais de entrada, uma ou mais camadas ocultas de neurônios e uma camada de saída com um número de neurônios igual ao número dos sinais de saída. O sentido que o sinal caminha é a partir da camada da frente até a camada de saída, daí o motivo de se dizer que o MLP é uma rede feedforward [30].

As redes MLP surgiram com a necessidade de que redes contendo somente uma camada resolvem apenas problemas linearmente separáveis, e a solução de problemas não linearmente separáveis passa pelo uso de redes com uma ou mais camadas intermediárias, ou escondidas; assim, a utilização de uma rede com uma camada intermediária pode implementar qualquer função contínua, e a utilização de duas camadas intermediárias permite a aproximação de qualquer função [31].

FIGURA 2-12 – ESQUEMA DE UMA REDE TIPO MLP [32]



³ Do inglês *MultiLayer Perceptron* (em português, perceptron de múltiplas camadas). Geralmente se utiliza o termo MLP mesmo em português.

O algoritmo de retropropagação pode ser descrito resumidamente em cinco etapas, conforme apresentadas a seguir:

- Primeiramente se realiza a inicialização da rede, onde se arbitram valores aleatórios aos pesos sinápticos e níveis de bias, em uma distribuição uniforme, cuja média deverá ser zero;
- Na sequência, faz-se a apresentação de uma época⁴ de exemplos à rede, e para cada exemplo, realiza-se a propagação dos sinais e a retropropagação dos erros com a correção dos pesos e níveis dos bias, conforme descrito nos dois itens abaixo;
- Na propagação dos sinais, aplica-se à camada de entrada da rede o vetor de sinais de entrada e calcula-se o campo local induzido e o sinal de saída para todos os neurônios, começando da camada de entrada até a camada de saída, onde se obtém o vetor de sinais funcionais da rede. Em seguida, calcula-se o sinal de erro para cada neurônio da camada de saída pela comparação de com o vetor dos sinais de saída desejados. Avaliam-se ainda o erro instantâneo e o erro médio global para finalização da rede.
- A retropropagação dos sinais de erro é realizada através de métodos de otimização, calculando-se os gradientes locais para todos os neurônios das camadas de saída, e em seguida os ajustes dos pesos daquela camada, que são somados aos valores atuais; o mesmo procedimento é repetido para a camada oculta, com a atualização dos seus respectivos pesos sinápticos e do bias; no caso de várias camadas, o procedimento é repetido até chegar na camada de entrada;
- Por fim, iteram-se as computações apresentando novas épocas de exemplo de treinamento para a rede de forma aleatória de época para época, até que seja satisfeito um critério de parada.

⁴ Uma *época* corresponde a uma apresentação completa do conjunto de treinamentos inteiros de uma rede neural. O processo de treinamento de uma rede neural é realizado de época em época.

2.5.3. Método BFGS

O método BFGS⁵ é um método de otimização não-linear com restrições que se aproxima do método de quase-Newton. O desenvolvimento do método pode ser encontrado em [33]. Segundo Haykin [34], o uso de métodos de otimização quase-Newton (como o BFGS) é restrito a redes neurais de pequena escala devido ao elevado tamanho das matrizes de busca.

2.6. CORRELAÇÕES LINEARES

Em pesquisas usualmente busca-se verificar a relação entre duas ou mais variáveis; estatisticamente, isso significa correlacionar, ou seja, verificar a força que mantém unido dois conjuntos de valores, e, uma vez caracterizada esta relação, procura-se descrevê-la matematicamente através de uma função de uma ou mais destas variáveis em relação a outra. A estimação dos parâmetros dessa função matemática é o objeto das correlações lineares [36].

Neste capítulo estaremos tratando brevemente de algumas aplicações que já foram realizadas para o desenvolvimento de inferências utilizando correlações lineares e também estaremos introduzindo o conceito de temperatura corrigida, que é de extrema importância para a obtenção de modelos lineares durante o processo de modelagem de colunas de destilação. Não estaremos tratando a respeito da teoria das correlações lineares, mas maiores informações podem ser obtidas através de livros de estatística e / ou otimização numérica.

2.6.1. Aplicações para Obtenção de Inferências

A literatura cita vários exemplos de utilização de correlações lineares para a obtenção de inferências, sendo a dos trabalhos realizados para inferência em torres de destilação atmosférica. Frozza e Luz Jr. [33], por exemplo, apresentam uma aplicação de utilização de modelos lineares para inferência de uma torre de destilação

⁵ As letras representam as iniciais dos sobrenomes de todos os autores: C.G. *Broyden*, R. *Fletcher*, D. *Goldfarb* e David F. *Shanno*.

atmosférica baseado em dados obtidos através de simulações em estado estacionário para o 95% vaporizados das correntes de diesel e nafta.

Reis Miranda e Porto Lusa [38] também realizaram trabalhos com inferências utilizando correlações lineares para os 85% vaporizados do diesel, fazendo também o uso de outras técnicas, como filtro de Kalman, simuladores de processo e polinômios ajustados. Silvestre [85] também realizou trabalhos para obtenção do 85% do diesel, porém com modelagem de cada uma das correntes que o compõe (nafta pesada, querosene e diesel).

2.6.2. Temperatura Corrigida

O uso da temperatura corrigida é uma ferramenta de grande valia para a determinação das temperaturas corrigidas, que nada mais é que uma forma de correlacionar indiretamente pressão e temperatura em uma única variável.

Embora o termo “temperatura corrigida” seja usualmente empregado na criação de sensores virtuais e inferências, a metodologia aplicada difere usualmente de autor para autor, podendo diferentes equações serem aplicadas. Em geral, a equação que se nota com mais frequência em trabalhos deste tipo é a equação de Clausius-Clayperon. Sua dedução parte da seguinte relação de Maxwell:

$$\left(\frac{\delta S}{\delta v}\right)_T = \left(\frac{\delta p}{\delta T}\right)_v \quad \text{Equação 2-12}$$

Como para um componente puro a temperatura é constante ao longo a mudança de fase, a pressão é independente do volume específico e é determinada apenas pela temperatura, e desta forma:

$$\left(\frac{\delta p}{\delta T}\right)_v = \left(\frac{dp}{dT}\right)_{sat} \quad \text{Equação 2-13}$$

Combinando a Equação 2-12 e a Equação 2-13, obtemos:

$$\left(\frac{\delta S}{\delta v}\right)_T = \left(\frac{dp}{dT}\right)_{sat} \quad \text{Equação 2-14}$$

Já que o lado direito da Equação 2-14 é fixo quando a temperatura é especificada, a equação pode ser integrada e sabendo que para uma mudança de fase de um líquido saturado para vapor saturado a temperatura e pressão permanecem constantes, temos:

$$dh = Tds \quad \text{Equação 2-15}$$

Temos, por fim, a equação de Clayperon (Equação 2-16), que é uma expressão que permite o cálculo da entalpia de vaporização (ou de sublimação ou de fusão) utilizando apenas dados p-v-T relativos à mudança de fase, ou ainda validar dados termodinâmicos, onde h_g e h_f são respectivamente as entalpias da fase gás e da fase líquido, v_g e v_f os volumes específicos de gás e líquido, p e T são respectivamente a pressão e a temperatura do sistema.

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{sat} = \frac{h_g - h_f}{T(v_g - v_f)} \quad \text{Equação 2-16}$$

Assumindo agora que v_f é desprezível em relação à v_g e que v_g possa ser correlacionado através da equação dos gases ideais ($v_g = RT/p$), a equação finalmente se transforma na equação de Clausius-Clayperon (Equação 2-17) [35].

$$\left(\frac{d(\ln p)}{dT}\right)_{sat} = \frac{h_g - h_f}{RT^2} \quad \text{Equação 2-17}$$

Para utilização prática, ainda se considera que a entalpia de vaporização é constante. Integrando a equação, considerando a pressão inicial como sendo uma pressão de referência e isolando a temperatura corrigida, obtemos a Equação 2-18 que será utilizada para a obtenção da temperatura corrigida:

$$T_{corr} = \left(\ln \left(\frac{P}{P_{ref}} \right) \cdot \frac{R}{\Delta H_{vap}} + \frac{1}{T} \right)^{-1} \quad \text{Equação 2-18}$$

Onde P é a pressão parcial da corrente no prato, P_{ref} é uma pressão de referência a ser arbitrada, R é a constante universal dos gases, ΔH_{vap} é a entalpia molar de vaporização da corrente e T é a temperatura da calha (ou do prato).

Repare que nesta equação não existem parâmetros ajustáveis, somente parâmetros que podem ser determinados através de outras correlações, como, por exemplo, a entalpia de vaporização e a massa molar do corte (para a obtenção da entalpia de vaporização molar).

Como forma de conhecimento, outras equações podem ser aplicadas para a obtenção de temperaturas corrigidas. Por exemplo, Ansari e Al-Otaibi [23] utilizaram uma forma modificada da equação de Clausius-Clayperon para uma aplicação particular conforme a Equação 2-19.

$$T_{comp} = \frac{T_k \cdot B_i}{T_k \cdot \ln P + B_i} \quad \text{Equação 2-19}$$

Onde T_{comp} é a temperatura corrigida, T_k é a temperatura do prato e B_i é o que foi chamado de coeficiente de Clausius-Clayperon, todos em unidades apropriadas. Shah e Goel [25] utilizaram para a obtenção da temperatura corrigida a equação de Antoine, descrita conforme Equação 2-20, onde P é a pressão de operação, P_r é a pressão de referência, T é a temperatura de operação e A e B são coeficiente de Antoine.

$$PCT = T - B \left[\left(\frac{1}{A - \ln P} \right) - \left(\frac{1}{A - \ln P_r} \right) \right] \quad \text{Equação 2-20}$$

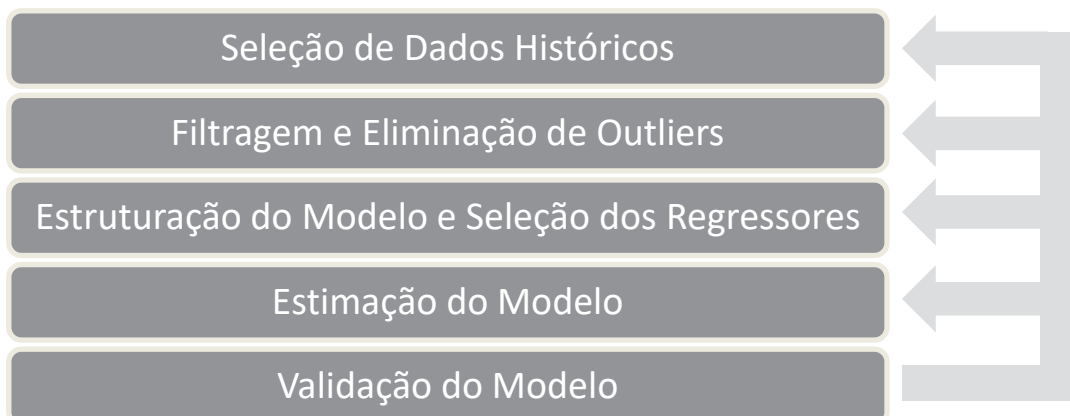
3. DESENVOLVIMENTO DO SENSOR VIRTUAL

O objetivo deste capítulo é sistematizar o processo de criação do sensor virtual para obtenção da destilação do LCO, permitindo assim a implementação de um sensor virtual que permita:

- Inferir a destilação do LCO como forma de avaliar seu comportamento durante as atividades de monitoramento da unidade;
- Controlar o 90% vaporizados durante as campanhas de diesel com baixo enxofre, permitindo assim uma maximização da rentabilidade causado pela redução do enxofre final do diesel e pelo aumento do tempo de campanha da unidade.

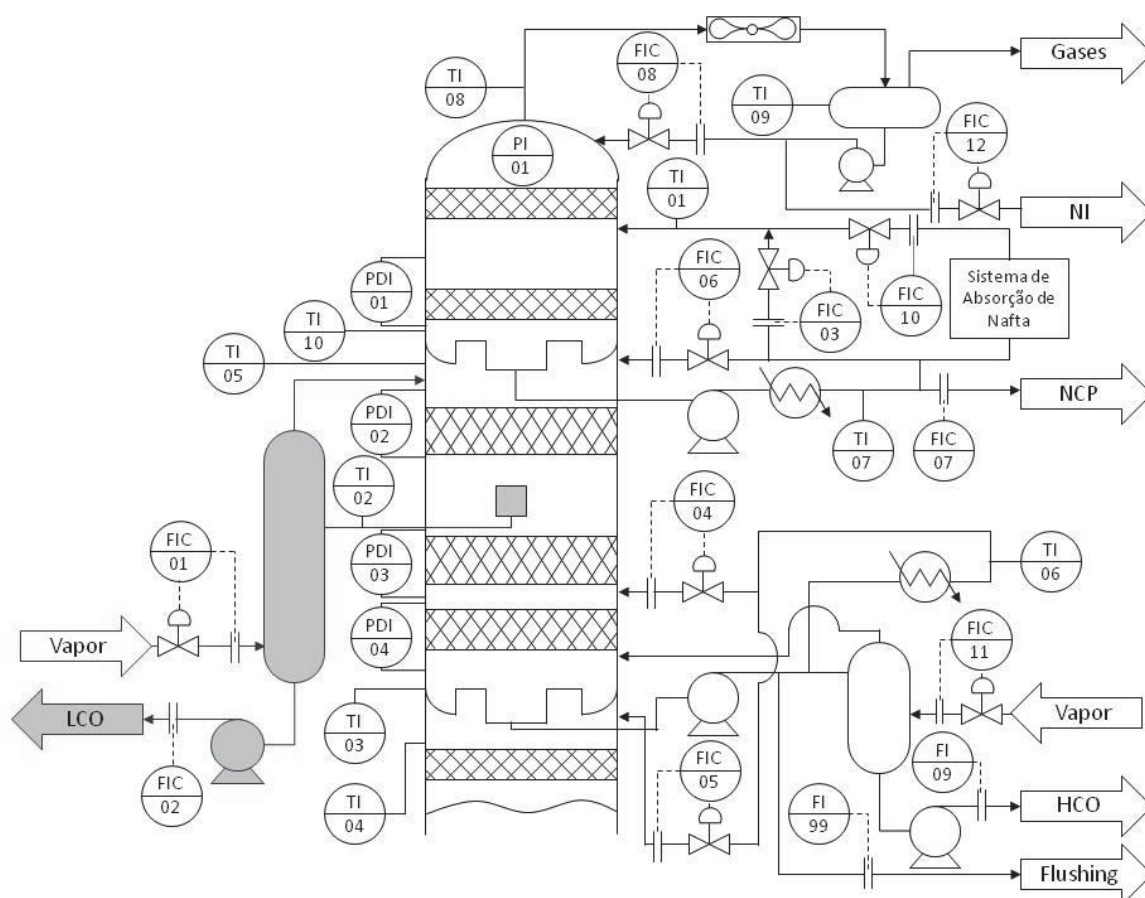
A metodologia aplicada para a criação do sensor virtual está descrita conforme a FIGURA 3-1, conforme descrita por Fortuna et al [20] onde são executadas diferentes etapas durante o processo e no caso de problemas com a validação do modelo retornam-se as etapas anteriores. Entretanto, este trabalho se fixará nas quatro primeiras etapas do processo de desenvolvimento do sensor virtual, ficando a parcela de validação do modelo para uma etapa posterior.

FIGURA 3-1 – PROCEDIMENTO PARA IDENTIFICAÇÃO DO SENSOR VIRTUAL



O sistema que estará sendo modelado está disposto na FIGURA 3-2. Trata-se de uma fracionadora de uma unidade de FCC que recebe a carga através do sistema riser-vaso separador (não mostrado) e realiza a separação inicial dos cortes para posterior envio ou tratamento nas demais unidades. Por motivos de sigilo, este fluxograma não mostra todos os trocadores e a instrumentação existente, somente aquela que foi preliminarmente selecionada durante a etapa de identificação das possíveis entradas no modelo em conjunto com os especialistas da planta.

FIGURA 3-2 – FLUXOGRAMA DE UMA FRACIONADORA DE FCC



O ponto de interesse é o que se encontra em cinza na FIGURA 3-2, que é a calha onde se realiza a coleta do LCO produzido pela unidade. Esta corrente possui dois destinos: ou é enviada para tanque para utilização como diluente de óleos combustíveis, ou é enviada para unidades de hidrotreatamento para produção de diesel. Como o diferencial de preço entre o óleo combustível e o diesel é bastante elevado, esta operação se torna vantajosa, desde que atendidos os quesitos de qualidade mencionados na Revisão Bibliográfica deste trabalho.

A TABELA 3-1 mostra a descrição de cada uma das variáveis dentro da fracionadora. Também por questões de sigilo industrial, todos os tags aqui mostrados possuem numeração fictícia que só serve para fins de indicação neste trabalho.

TABELA 3-1 – LISTA DE VARIÁVEIS DA FRACIONADORA

TAG	Descrição	Unidade
TI-01	Temperatura do reciclo circulante de NCP acima da panela NCP	°C
TI-02	Temperatura de retirada do LCO	°C
TI-03	Temperatura de retirada do HCO	°C
TI-04	Temperatura abaixo da retirada do HCO	°C
TI-05	Temperatura abaixo da retirada da NCP	°C
TI-06	Temperatura do reciclo circulante de HCO acima da retirada do HCO	°C
TI-07	Temperatura do reciclo circulante de NCP abaixo da retirada da NCP	°C
TI-08	Temperatura do topo da fracionadora	°C
TI-09	Temperatura do tambor de refluxo	°C
TI-10	Temperatura da retirada de NCP	°C
FIC-01	Vazão de vapor para a retificadora lateral de LCO	ton /h
FIC-02	Produção de LCO	m³/d
FIC-03	Vazão de NCP para Mistura de Reciclo Circulante para acima retirada de NCP	m³/d
FIC-04	Vazão de refluxo circulante de HCO para acima da retirada de HCO	m³/d
FIC-05	Vazão de refluxo circulante de HCO para abaixo da retirada de HCO	m³/d
FIC-06	Vazão de refluxo circulante de NCP para abaixo da retirada de NCP	m³/d
FIC-07	Produção de NCP	m³/h
FIC-08	Vazão de refluxo de topo da fracionadora	m³/d
FI-09	Produção de HCO	m³/d
FIC-10	Vazão de NCP de Absorção para Mistura de Reciclo Circulante acima da retirada de NCP	m³/d
FIC-11	Vazão de Vapor para Retificadora Lateral de HCO	m³/d
FIC-12	Produção do produto de topo	m³/d
PI-01	Pressão de topo	kgf/cm² (g)
PDI-01	Perda de carga na seção 01 da coluna	mm H ₂ O @ 20°C
PDI-02	Perda de carga na seção 02 da coluna	mm H ₂ O @ 20°C
PDI-03	Perda de carga na seção 03 da coluna	mm H ₂ O @ 20°C
PDI-04	Perda de carga na seção 04 da coluna	mm H ₂ O @ 20°C

A TABELA 3-2 mostra uma lista de variáveis ocultas, i.e., variáveis que foram utilizadas, mas que estão localizadas em pontos fora do fluxograma de processo. Estas variáveis serão utilizadas posteriormente para a realização de outros cálculos.

TABELA 3-2 – LISTA DE VARIÁVEIS OCULTAS

TAG	Descrição	Unidade
FI-13	Vazão Total de Carga para Riser	m ³ /d
FIC-14	Vazão de Nafta para Riser	m ³ /d
FI-15	Produção de Gás Combustível	Nm ³ /h
FI-16	Produção de GLP	m ³ /d
FIC-17	Produção de Nafta	m ³ /d
FIC-18	Injeção de Vapor / Ponto 01	ton/h
FIC-19	Injeção de Vapor / Ponto 02	ton/h
FIC-20	Injeção de Vapor / Ponto 03	ton/h
FIC-21	Injeção de Vapor / Ponto 04	ton/h
FI-22	Injeção de Vapor / Ponto 05	ton/h
FIC-23	Injeção de Vapor / Ponto 06	ton/h
FIC-24	Injeção de Vapor / Ponto 07	ton/h
FIC-25	Injeção de Vapor / Ponto 08	ton/h
FIC-26	Injeção de Vapor / Ponto 09	ton/h
FY-01	Injeção de Vapor / Ponto 10	ton/h

Por fim, a TABELA 3-4 mostra uma lista das variáveis calculadas com base em outras variáveis medidas das outras tabelas, juntamente com os seus respectivos blocos de cálculo e as suas respectivas unidades correspondentes. Para a criação dos cálculos foram necessárias algumas propriedades médias das correntes, que estão dispostas na TABELA 3-3. As variáveis de temperatura de reação e qualidade da carga não foram incluídas porque estas características praticamente não se alteram ao longo da campanha da unidade.

TABELA 3-3 – PROPRIEDADES DAS CORRENTES

Corrente	Massa Específica (kg/m³)	Massa Molar (kg/kmol)
GLP	546,0	49,6
Nafta Craqueada	757,5	98,4
NCP	906,8	180
LCO	965,3	199,3

TABELA 3-4 - VARIÁVEIS CALCULADAS

TAG	Descrição	Blocos de Cálculo	Unidade
FY-02	Somatória da Injeção de Vapor no Conversor	$= ([FIC-18] + [FIC-19] + [FIC-20] + [FIC-21] + [FI-22] + [FIC-23] + [FIC-24] + [FIC-25] + [FIC-26] + [FY-01]) \times 1000 \text{ kg.ton}^{-1}$	kg/h
FY-03	Somatória da Injeção de Vapor Retificação	$= ([FIC-01] + [FIC-11] + [FIC-18]) \times 1000 \text{ kg.ton}^{-1}$	kg/h
FY-04	Vazão Molar de Vapor	$= ([FY-02] + [FY-03]) / 18 \text{ kg.kmol}^{-1}$	kmol/h
FY-05	Vazão Molar de Gás Combustível	$= ([FI-15]) / 22,73 \text{ Nm}^3.\text{kmol}^{-1}$	kmol/h
FY-06	Vazão Molar de GLP	$= ([FI-16] \times d_{20/4_GLP}) / (PM_{GLP} \times 24 \text{ h.d}^{-1})$	kmol/h
FY-07	Vazão Molar de Nafta	$= ([FIC-17] \times d_{20/4_Nafta}) / (PM_{Nafta} \times 24 \text{ h.d}^{-1})$	kmol/h
FY-08	Vazão Molar de NCP	$= ([FIC-07] \times d_{20/4_NCP}) / (PM_{NCP})$	kmol/h
FY-09	Vazão Molar de LCO	$= ([FIC-07] \times d_{20/4_LCO}) / (PM_{LCO})$	kmol/h
FY-10	Fração Molar de LCO	$= ([FY-10]) / ([FY-04] + [FY-05] + [FY-06] + [FY-07] + [FY-08] + [FY-09])$	—
PY-01	Pressão no ponto de retirada do LCO	$= [PI-01] + ([PDI-01] + [PDI-02]) \times 0,0001 \text{ kgf/cm}^2 / \text{mm H}_2\text{O}$	kgf/cm ²
TY-01	Temperatura corrigida na retirada do LCO	$= \left(\frac{R}{PM_{LCO} \cdot \Delta H_{vap_{LCO}}} \cdot \ln \left(\frac{[PY-01] \cdot [FI-10]}{P_{Ref}} \right) + \frac{1}{[TI-02] + 273,15} \right)^{-1} - 273,15$	°C
FFI-01	Rendimento Volumétrico de LCO	$= [FIC-02] / ([FI-13] + [FIC-14])$	vol/vol
FFI-02	Razão de Refluxo de Topo	$= [FIC-08] / [FIC-12]$	vol/vol

3.1. SELEÇÃO DE DADOS HISTÓRICOS

Para a obtenção dos dados industriais, foram levantados pontos correspondentes ao período de julho de 2009 a dezembro de 2010, totalizando um número final de 184 pontos. Para estes dados foram aplicados os seguintes critérios de coleta:

- Os dados de processo levantados deveriam obrigatoriamente possuir análises de destilação realizadas em laboratório;
- Para todos os tags disponíveis foram levantadas a média e o desvio padrão de cada uma das variáveis para o período correspondente a uma hora antes do horário da amostragem;
- Todos os instrumentos previamente selecionados não deveriam apresentar status *bad-quality*;

Os dados foram coletados através do uso de softwares de aquisição de dados do SDCD da refinaria, enquanto os resultados das análises foram coletados através de um sistema proprietário de armazenamento de dados de análises.

Ainda, antes de iniciar as demais etapas e por motivo de confidencialidade, todos os dados foram normalizados de acordo com os máximos e mínimos apresentados nos conjuntos de dados extraídos do banco de dados de processo.

3.2. FILTRAGEM E ELIMINAÇÃO DE OUTLIERS

A filtragem dos dados se preocupou essencialmente em selecionar os pontos que estivessem em estado estacionário de forma a garantir que os resultados obtidos representassem bem a planta em condições estáveis, utilizando uma regra heurística utilizada anteriormente na criação de outras inferências. Para isso, foram realizados dois procedimentos distintos, a filtragem por falta de dados laboratoriais e a filtragem por variações no processo.

Para a filtragem por falta de dados laboratoriais foram excluídos todos os pontos que apresentavam pontos de destilação faltantes e / ou incondizentes com a curva de destilação, como por exemplo, um 90% vaporizados menor que um 70% vaporizados causado por diversas fontes de erro, como erro de digitação ou análise, por exemplo.

Para a filtragem de dados por falta por variações de processo, foram assumidos dois critérios de eliminação: os pontos cujo coeficiente de variação das medições de vazão e / ou pressão excedesse mais que 5% e os pontos onde o desvio padrão da temperatura fosse superior a 1 °C.

Assim, ao final do processo de filtragem sobraram cerca de 60 pontos (cerca de 32% do universo amostral original), sendo que dos 184 pontos originais cerca de 14 foram expurgados por problemas de análises e 110 foram expurgados por oscilações nas variáveis de processo. Apesar do número reduzido de pontos, existem referências na literatura de um mínimo de 60 pontos com diferentes medidas para a obtenção de uma boa correlação [25].

3.3. ESTRUTURAÇÃO DOS MODELOS E SELEÇÃO DOS PARÂMETROS DE REGRESSÃO

A estruturação dos modelos foi realizada através de duas formas distintas, uma utilizando correlações lineares simples e outra se utilizando de redes neurais do tipo MLP. O motivo de escolha destes tipos de modelos se deve aos seguintes fatores:

- Facilidade de estruturação do modelo com o uso de pacotes computacionais simples;
- Simplicidade para implementação em sistemas digitais de controle distribuído (SDCD);
- Em caso de desvios dos dados reais com os dados obtidos em planta, os novos dados podem ser utilizados para a obtenção ou atualização das inferências.

Em relação às correlações lineares, a seleção dos parâmetros de regressão foi baseada nos seguintes fatores:

- No uso de variáveis de processo reconhecidamente correlacionáveis com as propriedades inferidas e que possuem significado físico direto, tais como temperaturas da calha de retirada, o rendimento do derivado e a pressão da calha, como as da Equação 3-1 e Equação 3-2 (denominadas também de ML 01 e ML 02), onde TX% corresponde ao percentual vaporizado que se deseja correlacionar, o TI-02, o FFI-01 e o PY-01, que correspondem às variáveis de processo e a_0 à a_6 , que correspondem aos parâmetros ajustáveis da equação:

$$TX\%_{Corr01} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (FFI-01) \quad \text{Equação 3-1}$$

$$TX\%_{Corr02} = a_3 + a_4 \cdot (TI-02) + a_5 \cdot (FFI-01) + a_6 \cdot (PY-01) \quad \text{Equação 3-2}$$

- Na aplicação de parâmetros ajustáveis consagrados na literatura, como a temperatura corrigida pela equação de Clausius-Clayperon; neste caso se enquadram a Equação 3-3 e Equação 3-4 (também denominadas de ML 03 e ML 04), onde TX% corresponde ao percentual vaporizado que se deseja correlacionar, o TY-01 e o FFI-01, que correspondem às variáveis de processo, e a_7 , a_8 , a_9 , a_{10} e a_{11} , que correspondem aos parâmetros ajustáveis da equação.

$$TX\%_{Corr03} = a_7 + a_8 \cdot (TY-01) + a_9 \cdot (FFI-01) \quad \text{Equação 3-3}$$

$$TX\%_{Corr04} = a_{10} + a_{11} \cdot (TY-01) \quad \text{Equação 3-4}$$

- Na utilização de parâmetros que apresentassem maior significância estatística; para este caso, foi utilizada a Equação 3-5 (ou ML 05), onde TX% corresponde ao percentual vaporizado que se deseja correlacionar, o TI-03, o TI-05, o FIC-04, o FIC-06, o TY-01, o FFI-01 e o FFI-02, que correspondem às variáveis de processo e a_{12} , à a_{20} , que correspondem às constantes que deverão ser ajustadas através dos dados experimentais.

$$TX\%_{Corr05} = a_{12} + a_{13} \cdot (TI-03) + a_{14} \cdot (TI-05) + a_{15} \cdot (FIC-04) + a_{16} \cdot (FIC-06) + a_{17} \cdot (PY-01) + a_{18} \cdot (TY-01) + a_{19} \cdot (FFI-01) + a_{20} \cdot (FFI-02) \quad \text{Equação 3-5}$$

- Na utilização de modelos que realizassem a predição de um ponto de destilação baseado em outros pontos de destilação mais algumas variáveis que influenciam no processo. Estes modelos possuem a forma da Equação 3-6 e

da Equação 3-7 e correspondem respectivamente aos modelos ML 06 e ML 07. As variáveis utilizadas nestas equações são o TX%, que correspondem ao percentual vaporizado que se deseja correlacionar, o TI-02, o TY-01 e o FFI-01, que correspondem às variáveis de processo e os coeficientes a_{21} a a_{26} que são os parâmetros ajustáveis das equações.

$$TX\%_{Corr06} = a_{21} + a_{22} \cdot (TI-02) + a_{23} \cdot (FFI-01) + \sum_{i=1}^n Ti\% \cdot a_i \quad \text{Equação 3-6}$$

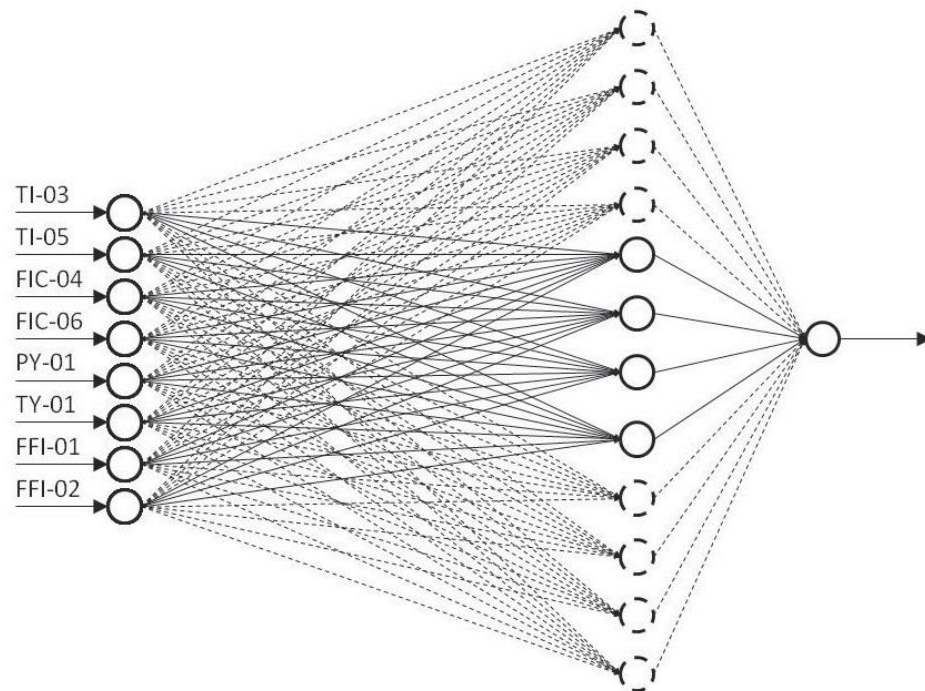
$$TX\%_{Corr07} = a_{24} + a_{25} \cdot (TY-01) + a_{26} \cdot (FFI-01) + \sum_{j=1}^n Tj\% \cdot a_j \quad \text{Equação 3-7}$$

É importante citar que nem todos os modelos foram aplicados a todos os pontos de destilação. Em geral, os modelos usualmente aplicados foram os ML 01 a ML 05, enquanto o ML 06 a ML 07 foram aplicados somente a casos onde os modelos lineares anteriormente testados não foram eficazes para realizar a predição dos valores.

Já para as redes neurais, foi utilizada uma modelagem das redes com arquitetura do tipo feedforward, utilizando-se para isso de redes do tipo MLP. Como padrão, foram testados três tipos de arquitetura de entrada:

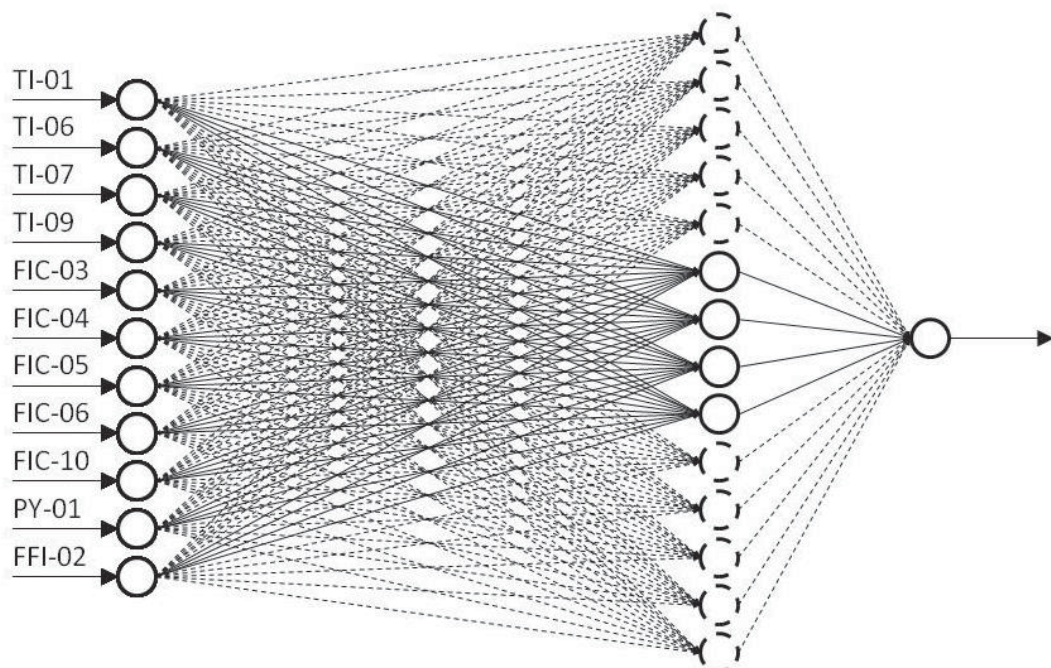
- Uma contendo um número mínimo de variáveis determinado através de um processo de “poda” da rede até a obtenção de um valor de correlação de treino / teste aceitável); As variáveis selecionadas estão mostradas na FIGURA 3-3, mostrando também o número máximo de neurônios permitidos (12) e o número mínimo (4).

FIGURA 3-3 – REDE MLP DO TIPO 01



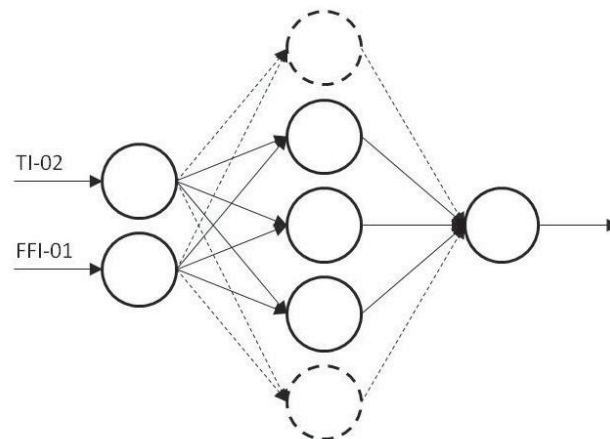
- Uma contendo somente as variáveis manipuláveis da torre, conforme mostrado na FIGURA 3-4.

FIGURA 3-4 – REDE MLP DO TIPO 02



- Uma contendo somente entradas com variáveis de processo reconhecidas e que também foram utilizadas nas correlações lineares. As variáveis utilizadas estão mostradas na FIGURA 3-5, limitados a um número mínimo de 3 neurônios e um número máximo de 5 neurônios.

FIGURA 3-5 – REDE MLP DO TIPO 03



Atentar que foram incluídos em todos os modelos uma entrada unitária de forma a garantir a existência do bias que não estão mostradas nas figuras acima.

Para cada uma das redes propostas, foram variados os seguintes parâmetros de forma possibilitar um melhor treinamento e um grau de resposta mais adequado e aderente com os resultados experimentais:

- O número de neurônios internos, limitados a valores mínimos e máximos especificados de acordo com cada rede conforme mencionado anteriormente;
- As funções de ativação tanto da camada oculta como da camada de saída, sendo para isso utilizadas as seguintes funções: logística, exponencial, identidade e tangente hiperbólica;
- O percentual de dados para treino e para teste (somente para RN 01);
- O universo amostral para os dados utilizados para o treino e para o teste da rede.

Em todos os casos, o algoritmo de treinamento utilizado para o treinamento das redes foi o BFGS, com um decaimento de peso tanto para a camada oculta como para a camada de saída com no mínimo de 0,0001 e no máximo 0,001 e utilizando a soma dos quadrados dos erros para a avaliação dos erros. Assim como nas correlações lineares, foram também geradas algumas redes adicionais para determinados pontos no caso de resultados insatisfatórios obtidos através dos treinos / testes das redes. O critério de seleção da melhor rede foi baseado nas seguintes premissas:

- Melhor resultado (menor erro) obtido no teste / treino da rede;
- Menor número de neurônios obtido durante o processo de teste / treino das redes.

3.4. ESTIMAÇÃO DOS MODELOS

De forma a reduzir o espaço dos nomes nas tabelas e gráficos que estarão dispostos a seguir, chamaremos de Matriz de Correlação simplesmente por MC e o Gráfico Matricial para Dados de Maior Significância de GMDMS.

3.4.1. Temperatura 10% Vaporizados

3.4.1.1. Matriz de Correlação

Inicialmente para avaliar quais variáveis apresentam melhor correlação com os 10% vaporizados, foi montada uma matriz de correlação para verificar qual variável possui maior significância estatística ou não. A TABELA 3-5 mostra os valores obtidos com maior grau de correlação de cada uma das variáveis selecionadas, sendo que as variáveis em *itálico* correspondem a variáveis com significância a $r < 0,05000$ para um universo de 59 pontos.

TABELA 3-5 – MC PARA 10 % VAPORIZADOS

Variável de Processo	R ²
TI-01	0,11
TI-02	0,91
TI-03	-0,05
TI-04	0,38
TI-05	0,63
TI-06	0,56
TI-07	0,15
TI-08	-0,34
TI-09	-0,16
TI-10	-0,07
FIC-03	0,25
FIC-04	0,55
FIC-05	0,23
FIC-06	0,14
FIC-10	0,26
PY-01	0,39
TY-01	0,95
FFI-01	-0,88
FFI-02	0,50

Para as variáveis com maior coeficiente de correlação foi montado um gráfico matricial para avaliar a forma que cada uma das variáveis independentes se comporta com a variável dependente e também como cada uma se comporta com relação às outras. A Figura 3-6 e FIGURA 3-7 mostram as correlações entre as variáveis de maior significância.

FIGURA 3-6 – GMDMS – CONJUNTO 01 – 10% VAPORIZADOS

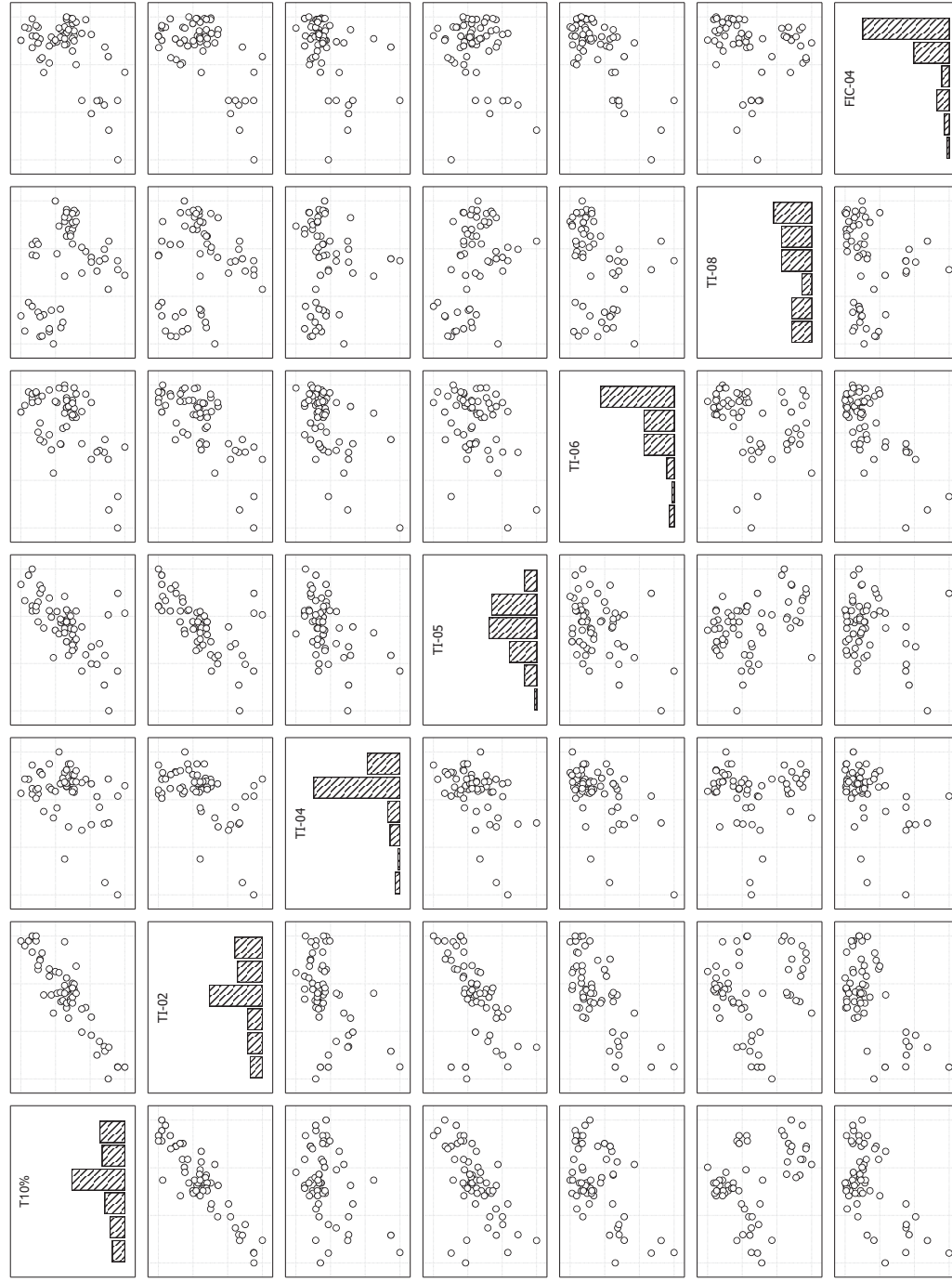
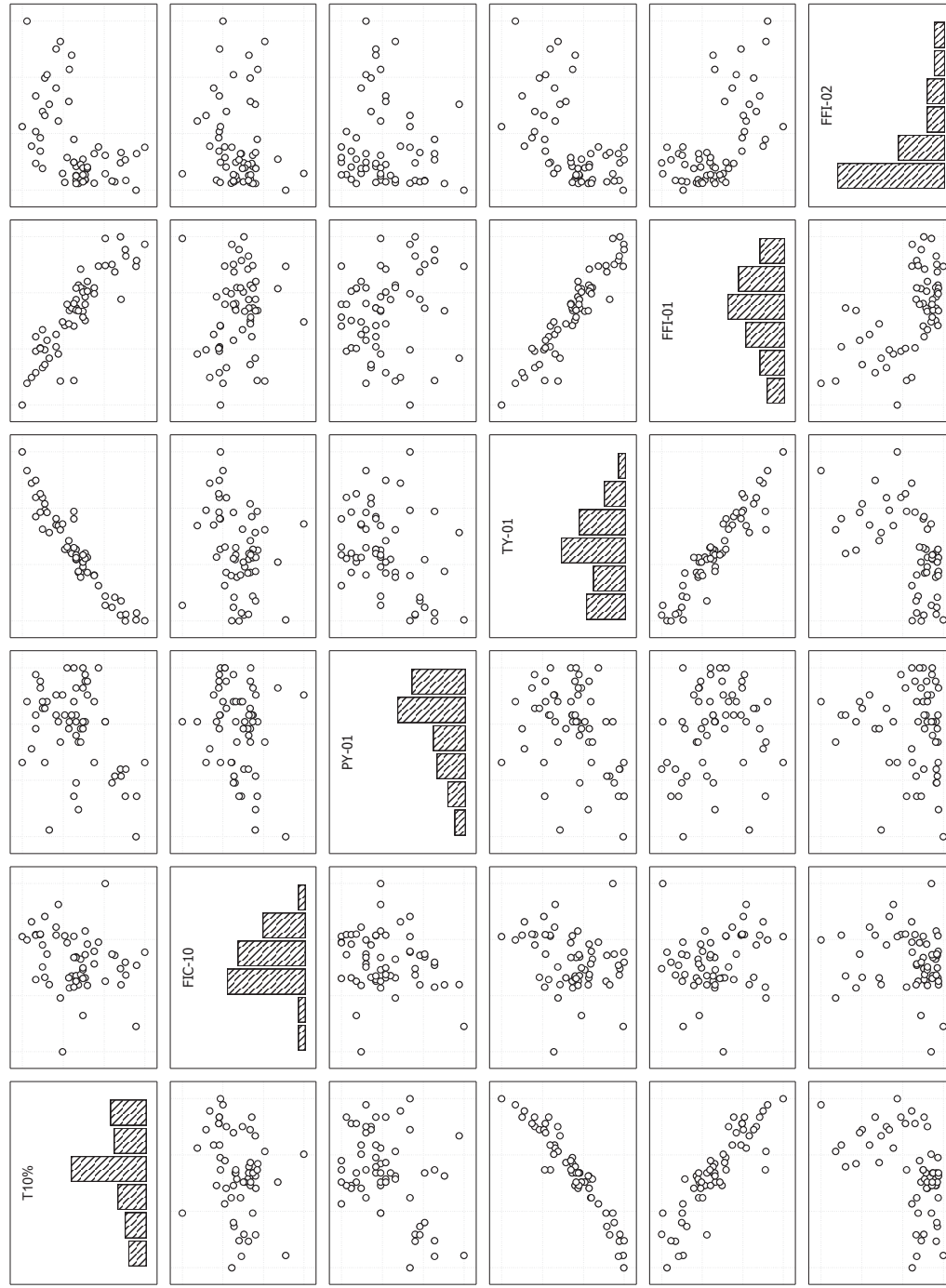


FIGURA 3-7 – GMDMS – CONJUNTO 02 – 10% VAPORIZADOS



As melhores correlações obtidas foram as da temperatura do prato (TI-02), a temperatura corrigida do prato através da equação de Clausius-Clayperon (TY-01) e o rendimento de LCO (FFI-01). Verifica-se também alguma linearidade dos 10% vaporizados com o TI-05, embora com a presença de alguns outliers.

3.4.1.2. Correlações Lineares Avaliadas

Os resultados obtidos para cada um dos modelos correlacionados estão dispostos no item Correlações Lineares: Resultados localizados nos Anexos, e foram testados dois conjuntos de correlações: uma, que vai desde o ML 01 até o ML 05, e outra também com os mesmos modelos, mas sem os outliers comuns verificados durante a primeira modelagem.

O melhor modelo obtido entre os modelos testados foi o ML 01 sem outliers (conforme TABELA 6-6). As seguintes razões fazem este modelo o selecionado:

- Apresentou o segundo melhor coeficiente de correlação ($R^2 = 0,9385$);
- Foi o único modelo que não apresentou outliers segundo o critério aplicado de dois desvios padrão;
- Necessitou de menor número de entradas, e estas entradas não precisam sofrer um cálculo prévio para obtenção destas variáveis;
- É fisicamente consistente, pois com o aumento da temperatura da panela é esperado um aumento dos 10% vaporizados, e um aumento de rendimento de LCO causa uma redução dos 10% vaporizados para cargas e severidades semelhantes.

A FIGURA 3.8 mostra os valores observados versus a predição obtida com o uso do Modelo 01 para 10% vaporizados, enquanto a Figura 3-9 mostra a curva de resíduos obtidos para o modelo. Repare que o modelo se ajustou muito bem aos dados experimentais em um intervalo de 95% de confiança, e com boa predição tanto no início como no fim da escala.

FIGURA 3-8 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR ML DE 10% VAPORIZADOS

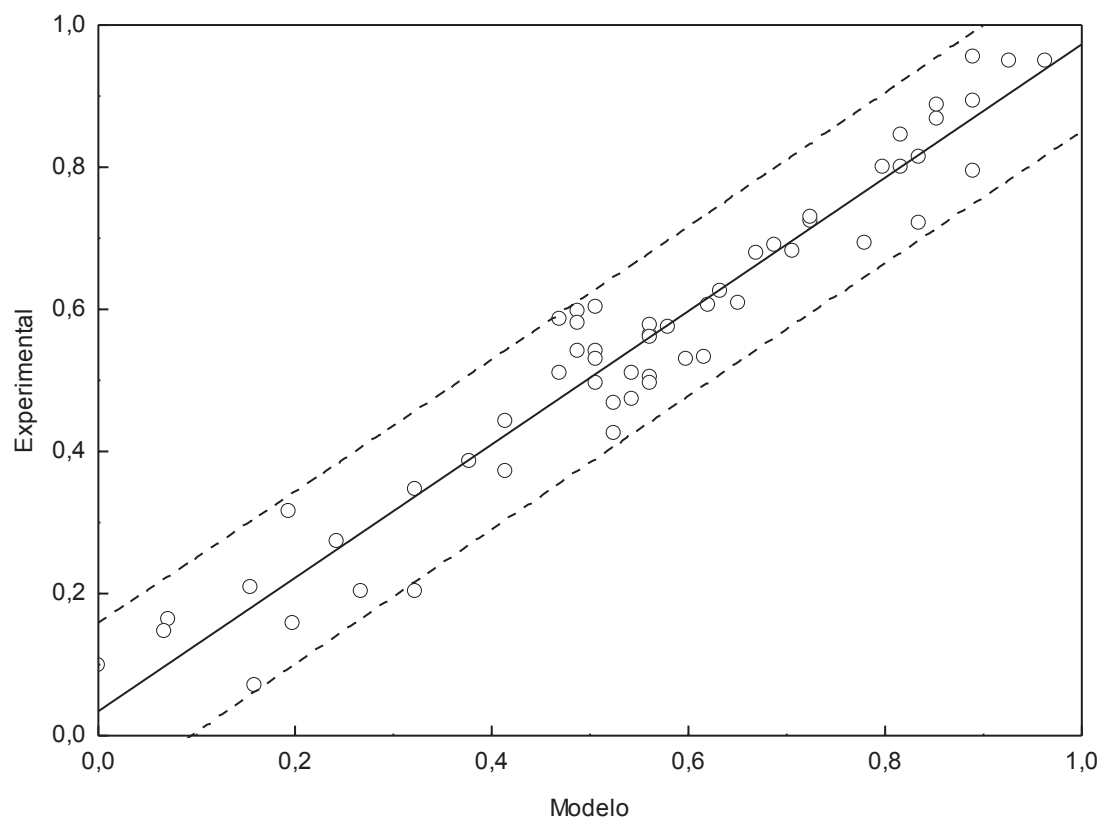
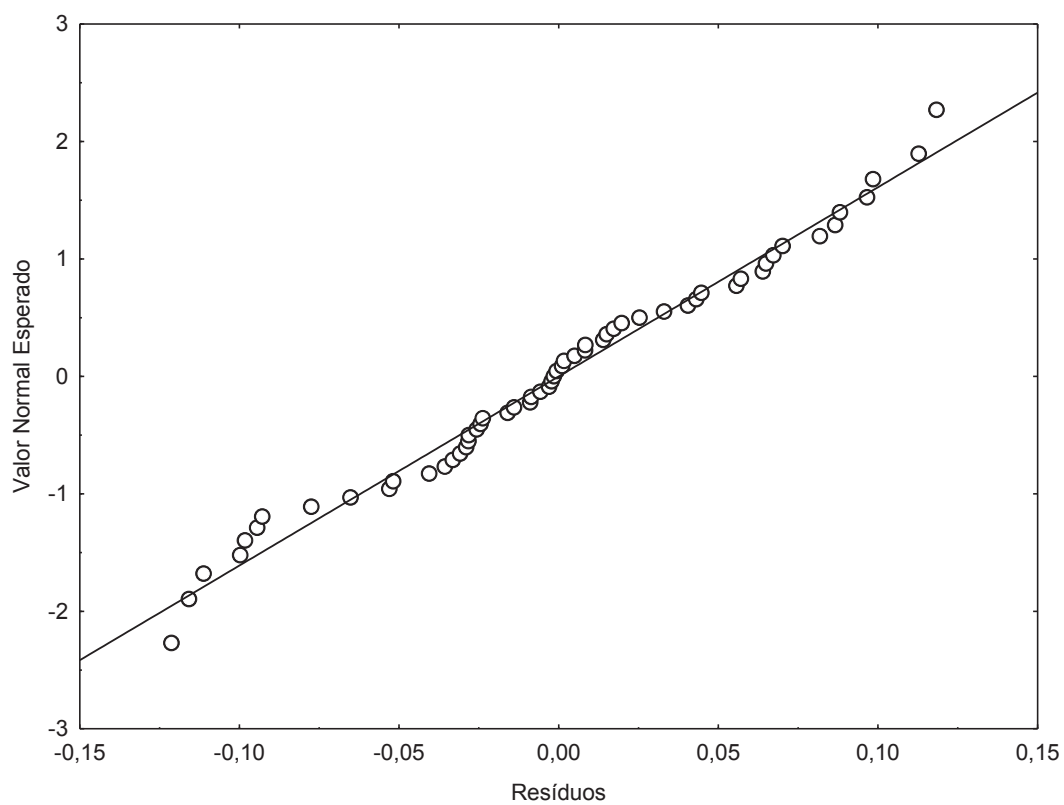


FIGURA 3-9 – CURVA DE RESÍDUOS PARA 10 % VAPORIZADOS



3.4.1.3. Redes Neurais Avaliadas

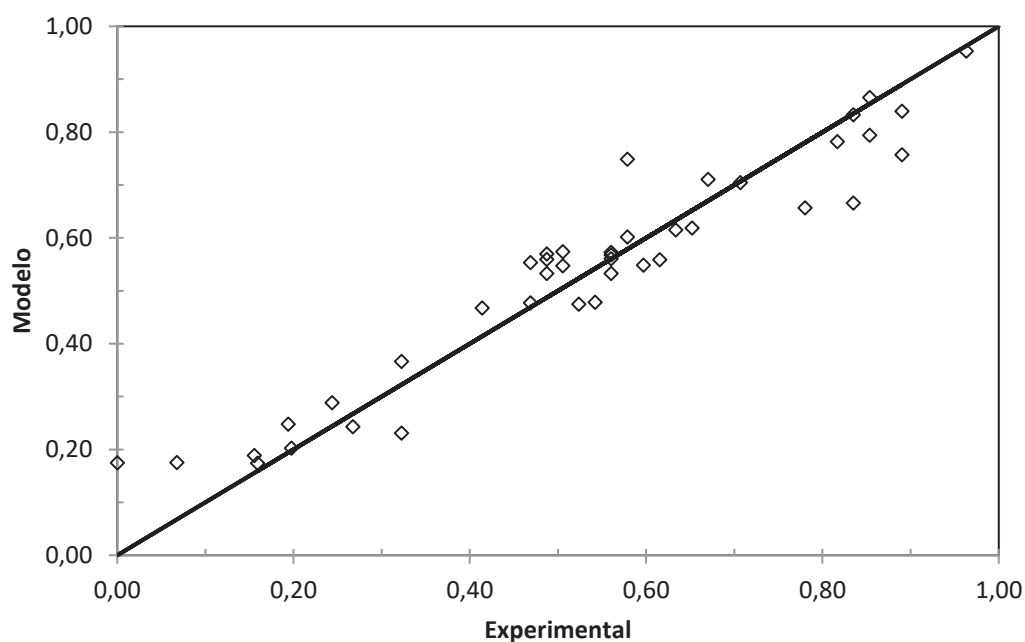
Para a obtenção dos 10% vaporizados, foram testadas 3 redes com distintas entradas (RN 01 a 03), utilizando cerca de 70% dos dados para treino e 30% dos dados para teste, com exceção da RN 01, que possuiu variação nos dados de treino / teste utilizando 50% treino / 50% teste e 90% treino / 10% teste, conforme mencionado no início do capítulo. Foram rodados um total de 5000 redes para cada caso, sendo retidas as 5 melhores redes que estão mostradas em diferentes rodadas, que são um total de 3 rodadas para cada conjunto de entrada / dados de treino-teste. Os resultados obtidos estão disponíveis no Anexo B a partir da página 126 que vão desde a TABELA 6-53 até a TABELA 6-57.

Nota-se a partir dos dados obtidos a ocorrência dos seguintes fatores:

- Durante o processo de variação do percentual de dados de treino / teste para a RN 01 verifica-se que, quando se aumenta o percentual de dados para treino o desempenho de treino para a rede cai, enquanto o desempenho para o teste aumenta;
- O desempenho das redes foi em geral bastante próximo para diferentes arquiteturas de entrada, com desempenho de teste superior a 0,94 para todos os casos.

A rede selecionada para ser utilizada como a inferência é a rede RN 01 com arquitetura 8-4-1 obtida na Rodada 01 com 17 épocas de treinamento (mostrada em negrito e itálico na TABELA 6-54), que apresentou, entre as redes com menor número de neurônios intermediários, o melhor desempenho tanto no treino como no teste. Repare que esta rede é mostrada duas vezes (com 17 e 18 épocas de treinamento), com performances diferentes ligeiramente próximas, mostrando esta ser uma arquitetura robusta para a correlação dos dados obtidos.

FIGURA 3-10 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR RN PARA 10 % VAPORIZADOS



A Tabela 3-6 e a Tabela 3-7 mostram, respectivamente, o peso das entradas para os neurônios ocultos e os pesos dos neurônios ocultos para a saída.

TABELA 3-6 – PESOS DOS NEURÔNIOS PARA MELHOR RN 10 % VAPORIZADOS

Entrada	Peso para Cada Neurônio			
	01	02	03	04
TI-03	-0,199920	0,062539	0,054153	0,073776
TI-05	0,052531	0,218330	-0,216899	0,102977
FIC-04	-0,022708	0,012175	0,088402	0,048122
FIC-06	0,018233	0,417685	-0,060273	-0,003196
PY-01	-0,055072	0,018181	-0,022330	0,000363
TY-01	0,223418	0,367592	0,146397	-0,101298
FFI-01	0,473010	0,066666	-0,047144	-0,228235
FFI-02	-0,071289	-0,774462	0,369668	0,074386
Bias	0,149060	0,177719	0,046883	0,129543

TABELA 3-7 – PESOS NEURÔNIOS INTERMEDIÁRIOS PARA MELHOR RN 10% VAPORIZADOS

Entrada	Peso
01	0,397515
02	0,747008
03	0,399765
04	-0,391615
Bias	-0,732546

Por fim, a TABELA 3-8 mostra uma análise de sensibilidade das variáveis selecionadas para a rede obtida. Como era de se esperar, a maior sensibilidade obtida é a referente à temperatura corrigida da calha (TY-01), seguido do rendimento do LCO.

TABELA 3-8 – ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DA MELHOR RN PARA 10% VAPORIZADOS

Variável	Sensibilidade
TI-03	1,022398
TI-05	1,004078
FIC-04	1,125521
FIC-06	1,094025
PY-01	1,141887
TY-01	8,92606
FFI-01	1,534860
FFI-02	0,973516

3.4.2. Temperatura 30% Vaporizados

3.4.2.1. Matriz de Correlação

Da mesma forma que foi feita para o 10% vaporizados, a TABELA 3-9 mostra os valores obtidos de significância de cada uma das variáveis possíveis para 30%, sendo que as variáveis em *itálico* correspondem às variáveis com significância a $r < 0,05000$ para um universo de 59 pontos.

TABELA 3-9 – MC PARA 30% VAPORIZADOS

Variável de Processo	R ²
TI-01	0,10
TI-02	0,90
TI-03	-0,07
TI-04	0,33
TI-05	0,59
TI-06	0,59
TI-07	0,13
TI-08	-0,31
TI-09	-0,18
TI-10	-0,09
FIC-03	0,29
FIC-04	0,57
FIC-05	0,24
FIC-06	0,12
FIC-10	0,27
PY-01	0,40
TY-01	0,94
FFI-01	-0,87
FFI-02	0,46

O gráfico matricial também foi montado e se encontra disponível na FIGURA 3-11 e na FIGURA 3-12 para também se avaliar o comportamento das variáveis com maior significância.

FIGURA 3-11 – GMDMS – CONJUNTO 01 – 30 % VAPORIZADOS

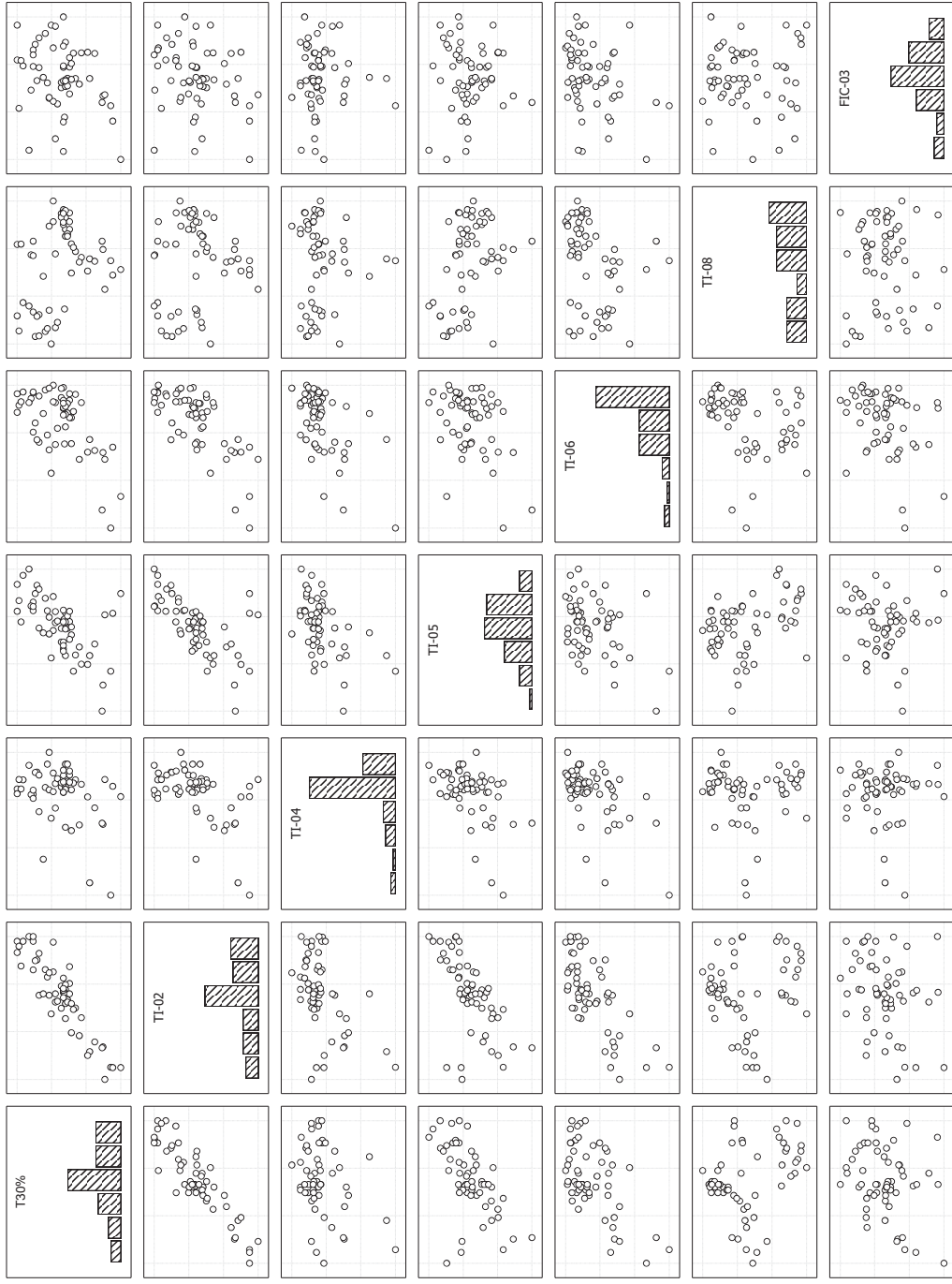
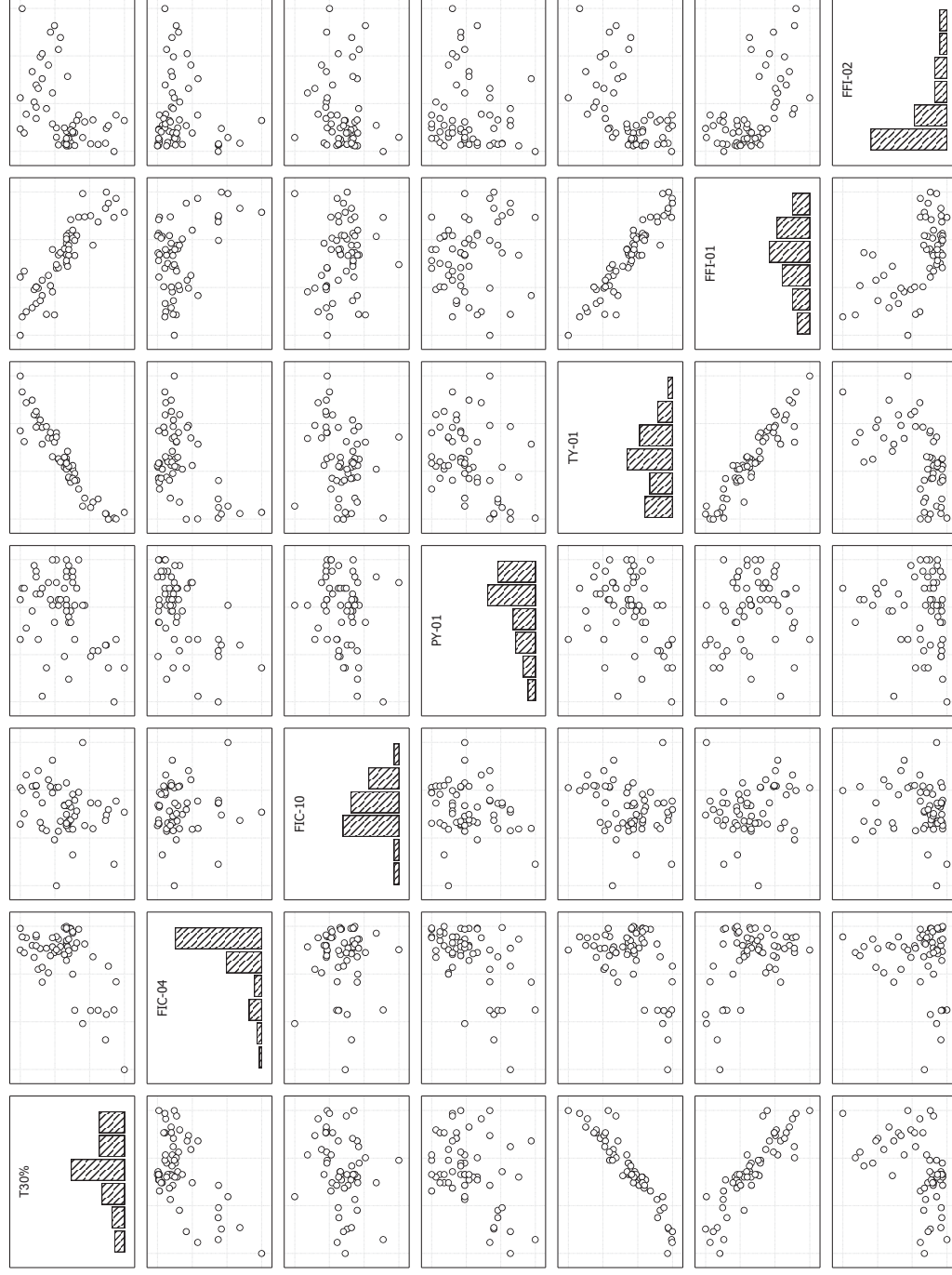


FIGURA 3-12 – GMDMS – CONJUNTO 02 – 30% VAPORIZADOS



As variáveis que apresentaram maior linearidade foram a temperatura da calha (TI-02), a temperatura corrigida da calha através da equação de Clausius-Clayperon (TY-01) e o rendimento de LCO (FFI-01). Verifica-se também alguma linearidade dos 10% vaporizados com o TI-05, embora com a presença de alguns outliers.

3.4.2.2. Correlações Lineares Avaliadas

Os resultados obtidos para os modelos correlacionados (com e sem outliers comuns identificados aplicando o processo de dois desvios padrão) estão descritos desde a TABELA 6-11 até a TABELA 6-20 a partir da página 113 dos Anexos.

Entre os modelos testados, foi selecionado o ML 01 sem outliers (TABELA 6-16) por conta das seguintes razões das seguintes razões:

- Apresentou a segunda melhor correlação ($R^2 = 0,9309$);
- Os desvios de todos os coeficientes de correlação foram menores que o valor dos coeficientes;
- Necessita de menor número de variáveis independentes, e estas entradas não precisam sofrer um cálculo prévio para obtenção destas variáveis;
- É fisicamente consistente, assim como o modelo apresentado para a correlação dos 10% vaporizados;

A FIGURA 3-13 mostra os valores observados versus modelo para os 30% Vaporizados. Já a FIGURA 3-14 mostra a curva de resíduos obtidos para o modelo. Embora o modelo tenha se ajustado bem à maioria dos dados, cerca de 3 pontos apareceram como outliers mesmo com a retirada dos outliers comuns a todos os modelos.

FIGURA 3-13 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR ML PARA 30 % VAPORIZADOS

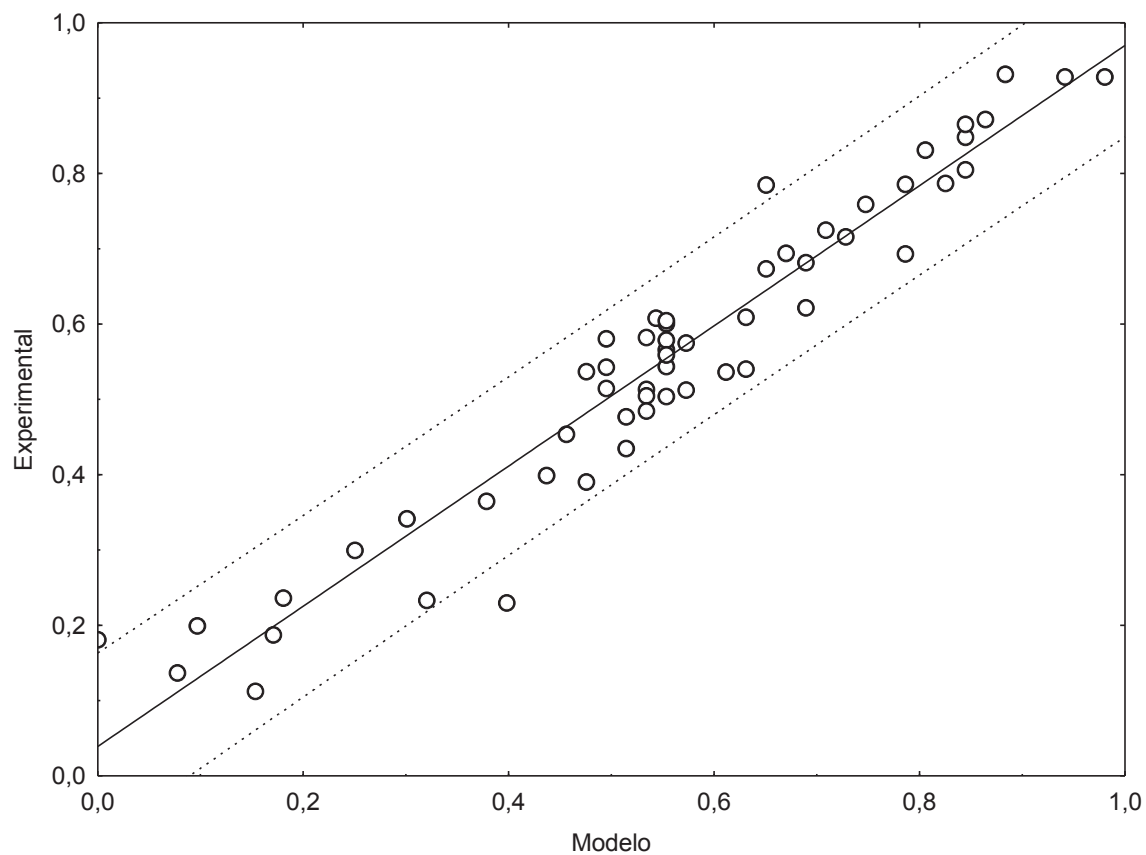
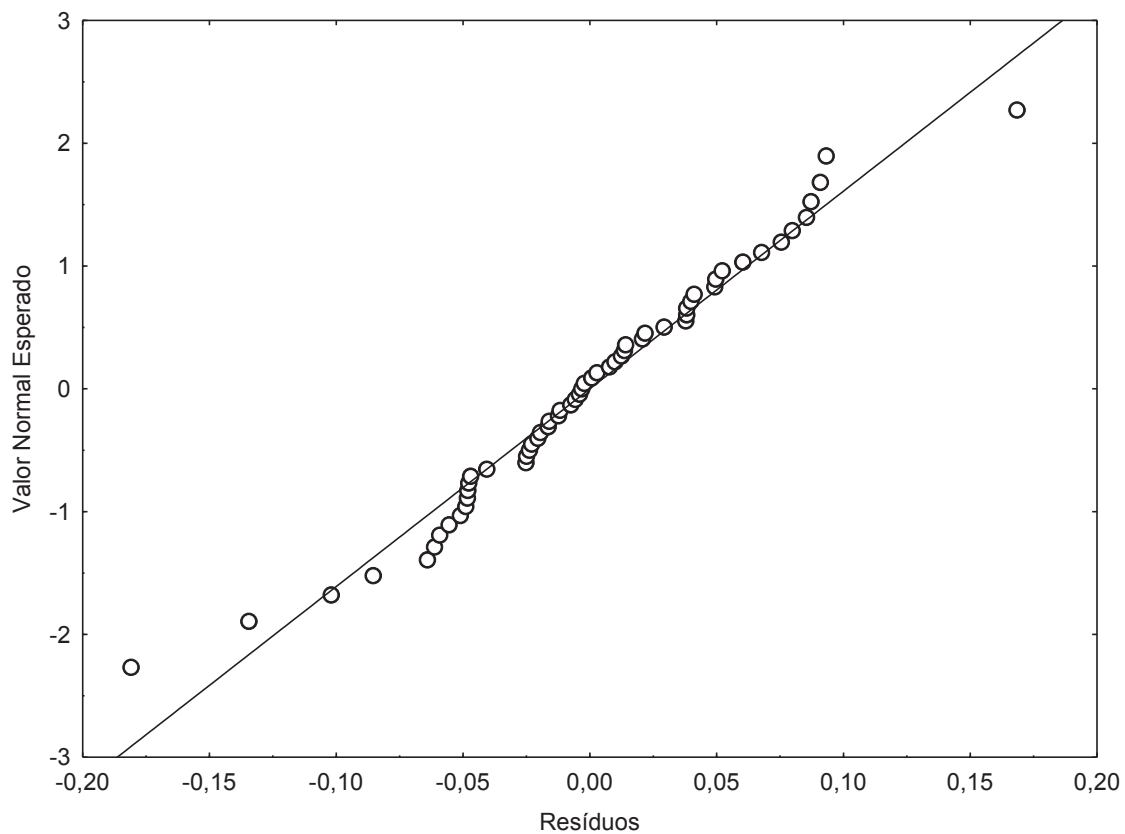


FIGURA 3-14 – CURVA DE RESÍDUOS PARA 30 % VAPORIZADOS

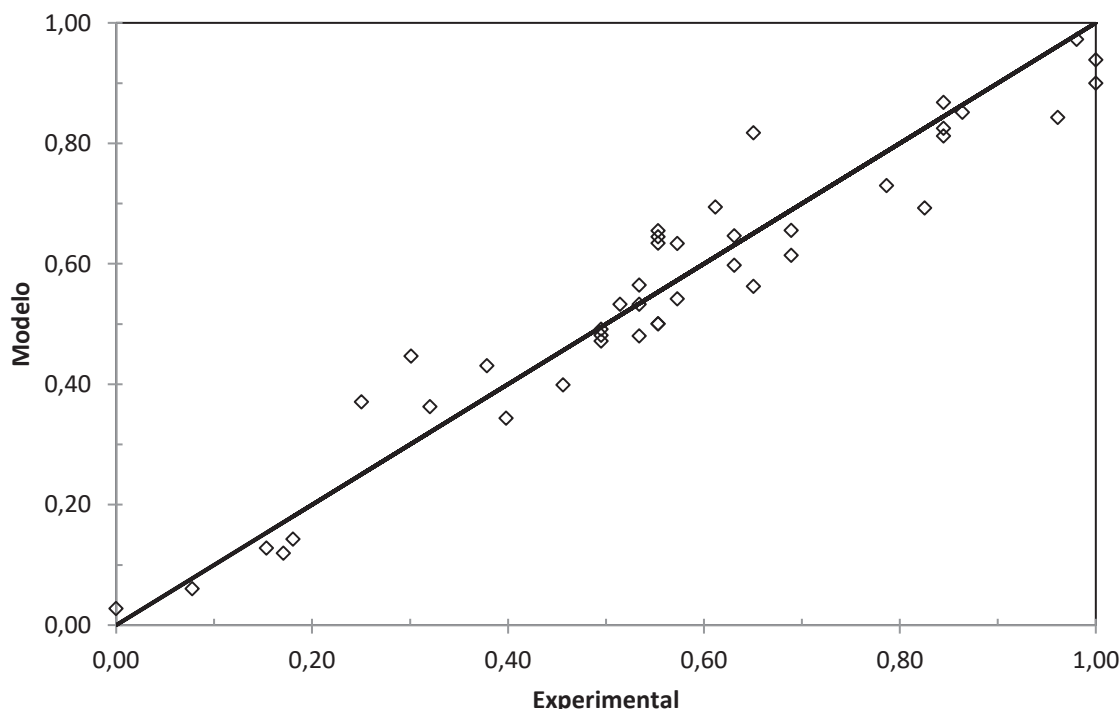


3.4.2.3. Redes Neurais Avaliadas

As redes neurais testadas para os 30% vaporizados seguiram a mesma metodologia da utilizada para as redes neurais dos 10% vaporizados, e os resultados obtidos estão disponíveis no Anexo deste trabalho a partir da página 131 (desde a TABELA 6-58 até a TABELA 6-62). A rede selecionada foi a RN 02, com uma arquitetura 11-4-1 (vide o item em **negrito e itálico na** TABELA 6-61) pelo fato de esta ser a rede que apresentou melhor desempenho de treino / teste e também a que possuía o menor número de neurônios de ocultos, embora a escolha pudesse recair em outras redes, já que os resultados foram bastante semelhantes mesmo para redes com entradas distintas.

A FIGURA 3-15 mostra os resultados obtidos para a correlação dos 30% vaporizados com o uso de redes neurais, mostrando uma boa correlação entre os valores experimentais e o modelo, e apresentando um coeficiente de correlação de 0,9247.

FIGURA 3-15 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR RN PARA 30 % VAPORIZADOS



A TABELA 3-10 e a TABELA 3-11 mostram, respectivamente, o peso das entradas para os neurônios ocultos e os pesos dos neurônios ocultos para a saída.

TABELA 3-10 — PESOS DOS NEURÔNIOS ENTRADA DA MELHOR RN 30% VAPORIZADOS

Entrada	Peso para Cada Neurônio			
	01	02	03	04
TI-01	0,75428	-0,11898	0,58766	0,40116
TI-06	-1,04165	-0,30699	0,40233	-0,32179
TI-07	-0,44170	-0,18686	0,06239	-0,13149
TI-09	-1,35389	0,21426	0,24240	-0,66050
FIC-03	0,86647	0,59046	0,16967	-0,01461
FIC-04	-0,54812	0,60540	0,11879	-0,29339
FIC-05	-0,07590	0,03429	-0,17969	-0,42369
FIC-06	0,02940	0,33381	-0,23330	-0,35561
FIC-10	-0,32233	0,00209	0,77361	0,49659
PY-01	-0,10825	0,12826	0,08154	0,54152
FFI-02	-0,93570	-0,20903	0,20505	0,48634
Bias	-0,81728	0,35464	-0,24895	-1,07970

TABELA 3-11 — PESOS DOS NEURÔNIOS INTERMEDIÁRIOS DA MELHOR RN 30% VAPORIZADOS

Entrada	Peso
01	-1,62264
02	0,74379
03	-0,65057
04	2,23021
Bias	0,40051

Por fim, a TABELA 3-12 mostra uma análise de sensibilidade das variáveis selecionadas para a rede obtida. A variável que apresentou maior influência sobre os 30% vaporizados foi a FIC-06, que está diretamente relacionada com a temperatura da calha de LCO, uma vez que, com o aumento do refluxo circulante, a tendência da temperatura da torre é de queda para baixo do ponto de entrada do refluxo, causando consequentemente a redução dos 30% vaporizados.

TABELA 3-12 — ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DA MELHOR RN PARA 30% VAPORIZADOS

Variável	Sensibilidade
TI-01	4,341
TI-06	8,992
TI-07	2,213
TI-09	1,641
FIC-03	2,428
FIC-04	1,446
FIC-05	3,747
FIC-06	11,593
FIC-10	1,105
PY-01	2,673
FFI-02	3,339

3.4.3. Temperatura 50% Vaporizados

3.4.3.1. Matriz de Correlação

Da mesma forma que nos itens anteriores, a TABELA 3-13 mostra os valores obtidos de significância de cada uma das variáveis, sendo que as variáveis em *itálico* correspondem à variáveis com significância a $r < 0,05000$ para um universo de 59 pontos, assim como a FIGURA 3-16 e a FIGURA 3-17, que mostram os gráficos matriciais de variáveis com maior significância.

TABELA 3-13 — MC PARA 50% VAPORIZADOS

Variável de Processo	R ²
TI-01	0,09
TI-02	0,88
TI-03	-0,01
TI-04	0,30
TI-05	0,57
TI-06	0,57
TI-07	0,14
TI-08	-0,30
TI-09	-0,21
TI-10	-0,05
FIC-03	0,29
FIC-04	0,50
FIC-05	0,25
FIC-06	0,10
FIC-10	0,29
PY-01	0,39
TY-01	0,92
FFI-01	-0,84
FFI-02	0,43

FIGURA 3-16 – GMDMS – CONJUNTO 01 – 50 % VAPORIZADOS

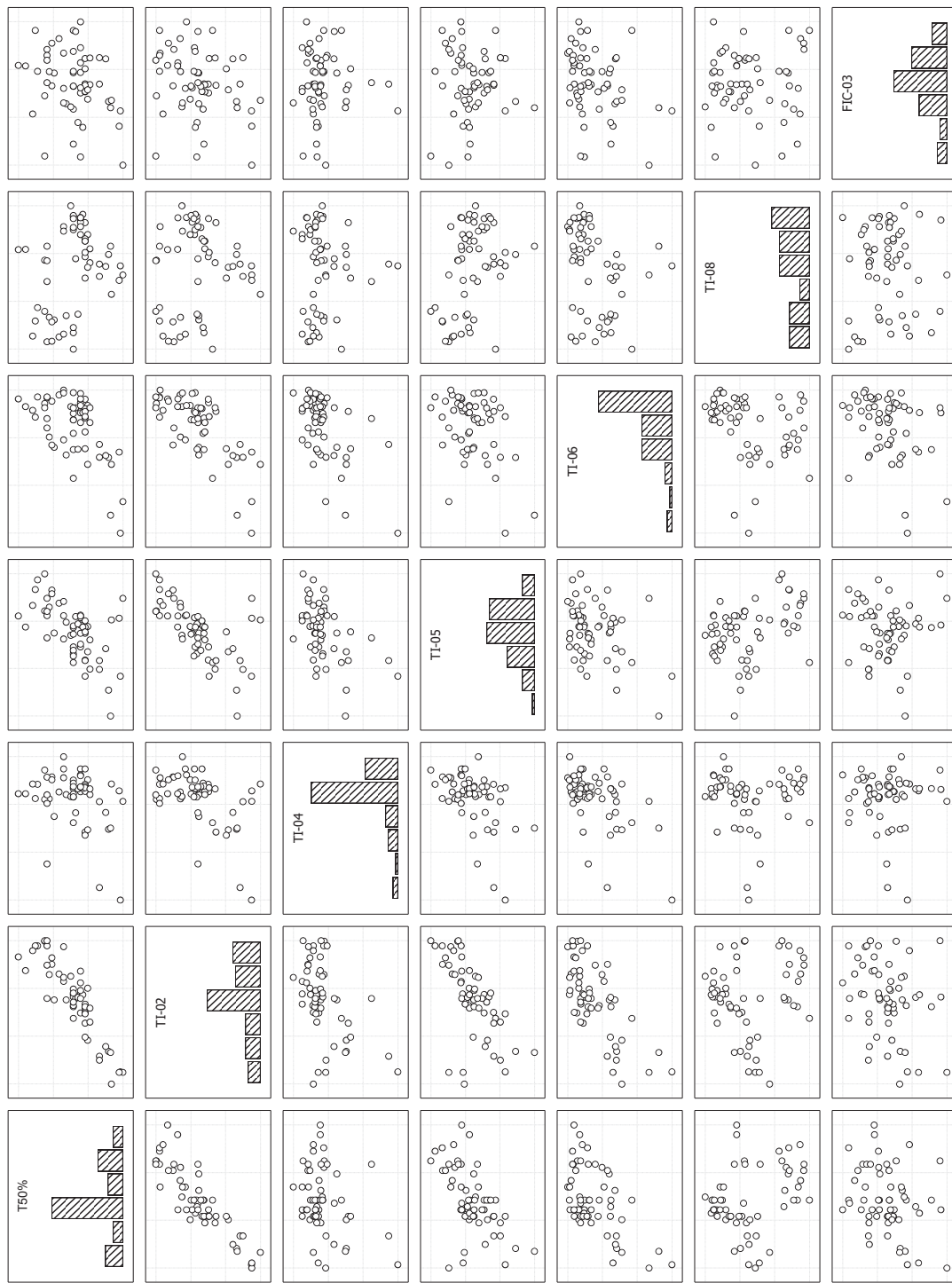
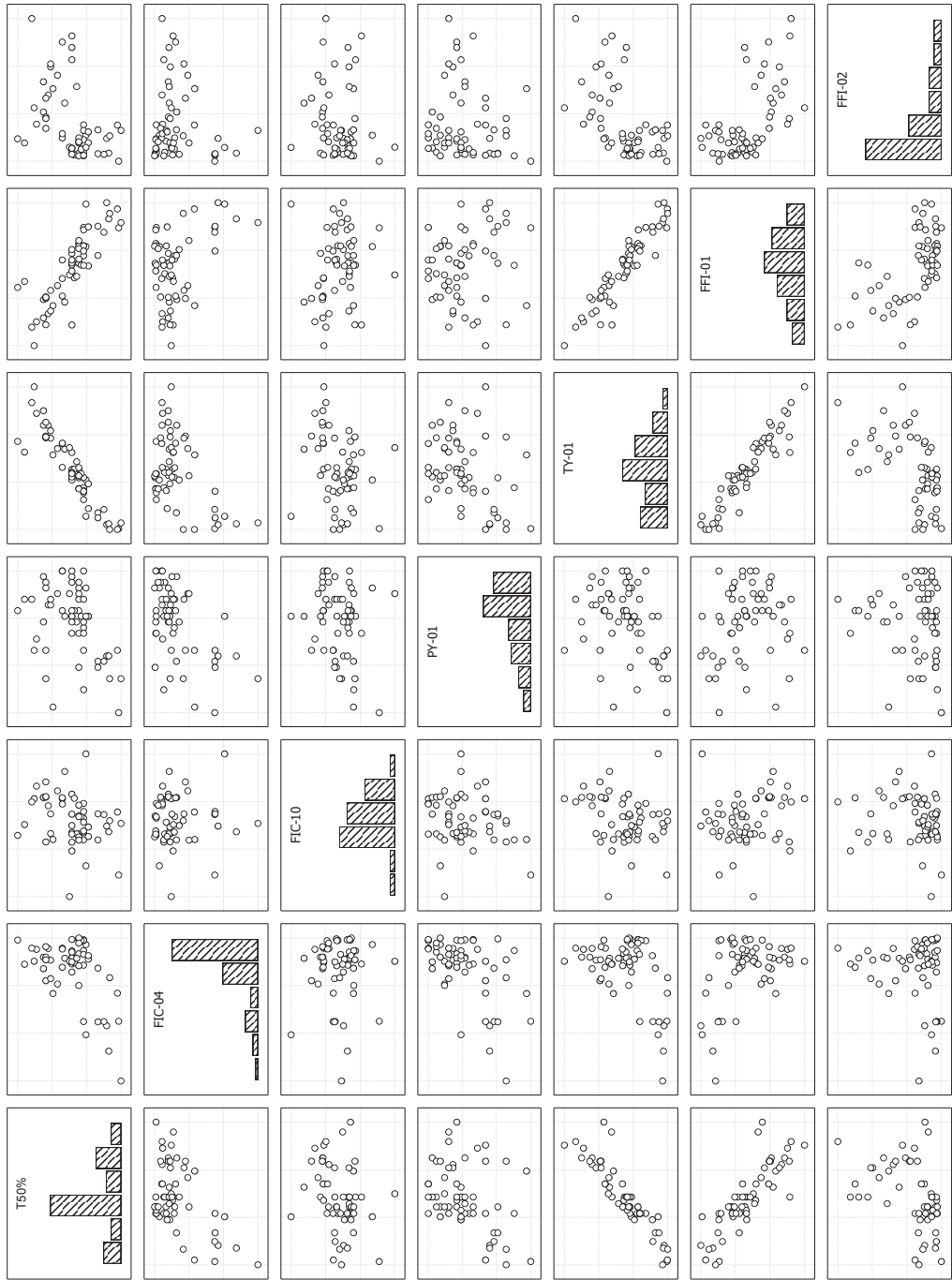


FIGURA 3-17 – GMDMS – CONJUNTO 02 – 50 % VAPORIZADOS



3.4.3.2. Correlações Lineares Avaliadas

Os resultados obtidos para a modelagem linear dos 50% vaporizados estão dispostos no anexo desde a TABELA 6-21 até a TABELA 6-30, utilizando a mesma metodologia de obter os modelos, verificar os outliers comuns, excluí-los e obter novamente os mesmos modelos sem os outliers comuns a todos os modelos.

O modelo selecionado para o processo foi o ML 04 (TABELA 6-29) pelo fato deste apresentar uma boa correlação em toda a faixa testada. Apesar dos ML 01 e 02 terem um coeficiente de correlação ligeiramente superior ao ML 04, eles apresentam erros mais apreciáveis nos extremos da função. Entretanto, para a utilização deste modelo será necessário a utilização das temperaturas corrigidas, o que na prática depende de outros fatores que não somente a temperatura, tais como as retiradas acima da de LCO e também a pressão e a perda de carga até a calha de LCO.

A FIGURA 3-18 mostra os valores observados versus a predição obtida com o uso do Modelo 04 para 50% vaporizados, enquanto a FIGURA 3-19 mostra a curva de resíduos obtidos para o modelo.

FIGURA 3-18 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR ML DE 50 % VAPORIZADOS

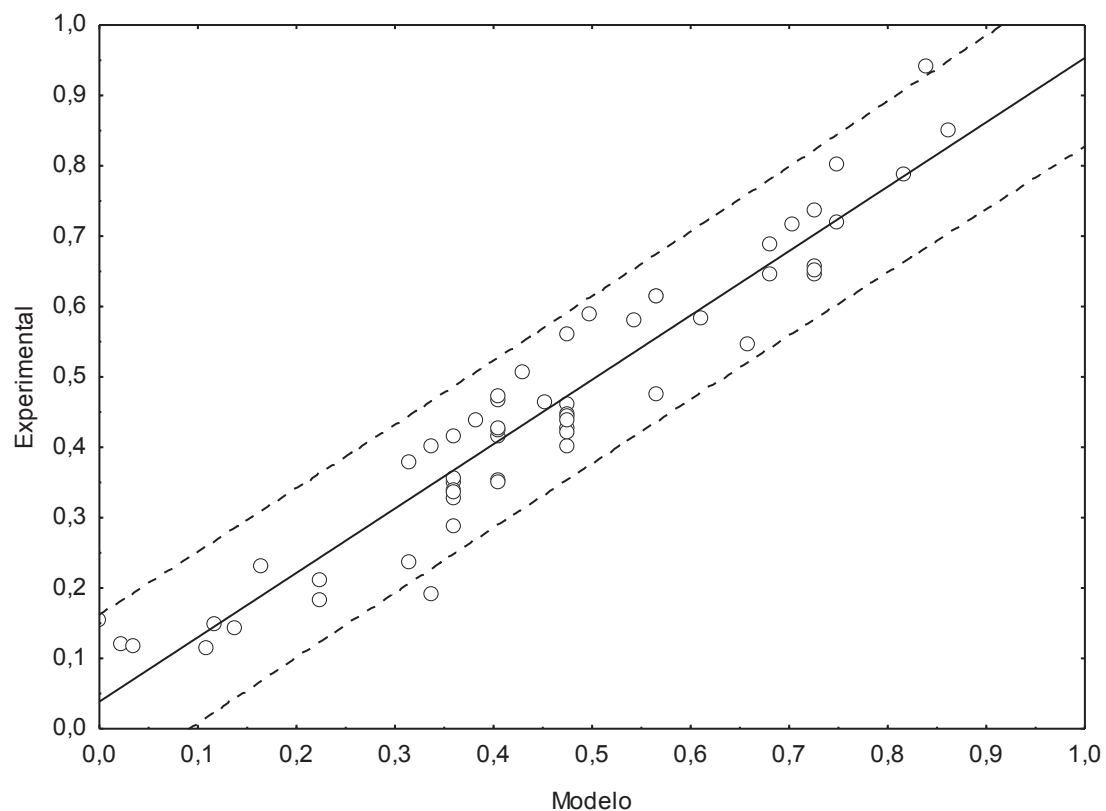
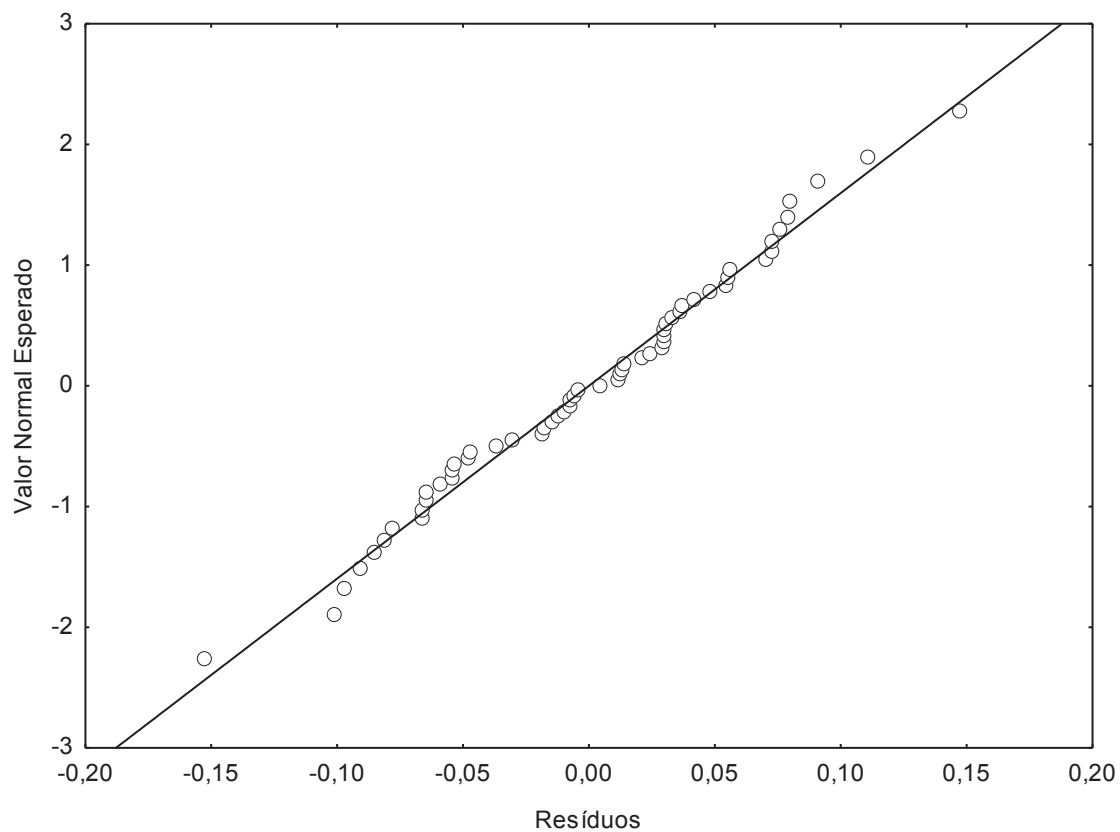


FIGURA 3-19 – CURVA DE RESÍDUOS PARA 50 % VAPORIZADOS

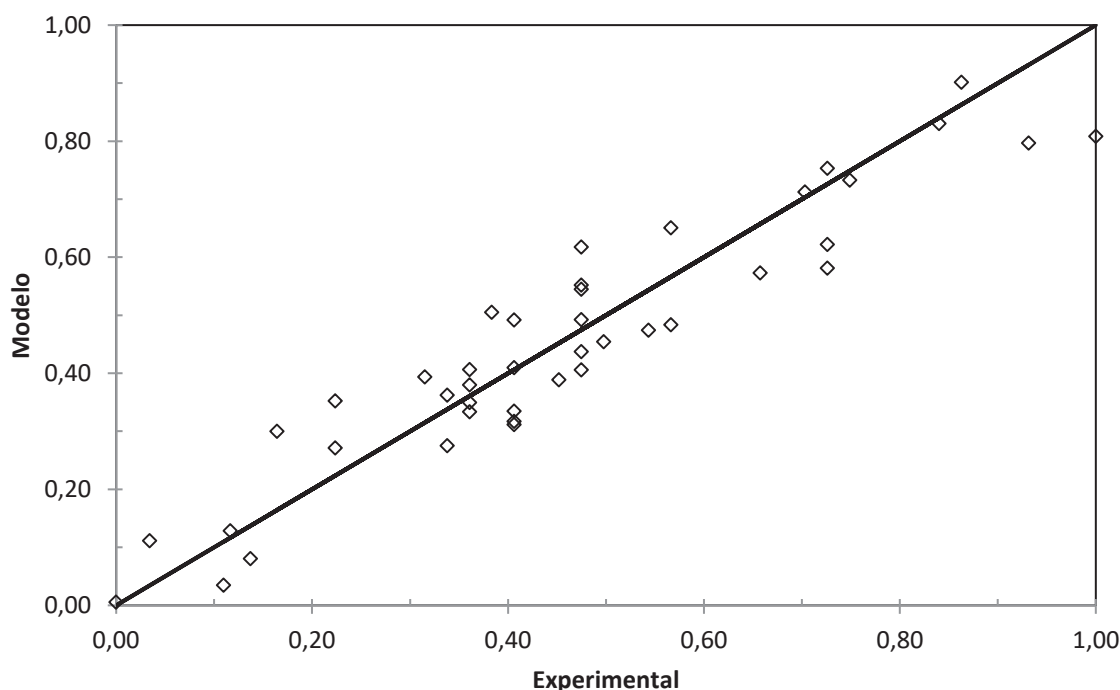


3.4.3.3. Redes Neurais Avaliadas

Foi aplicado o mesmo procedimento adotado anteriormente para a identificação da melhor rede, todas contidas no Anexo deste trabalho (vide TABELA 6-63 e TABELA 6-69 para maiores detalhes). Aplicando o mesmo critério de seleção anteriormente adotado, observa-se que a RN 02 com arquitetura 11-4-1 foi a rede que, além de apresentar o melhor resultado de teste, foi também a que teve o menor número de neurônios na camada intermediária.

A FIGURA 3-20 mostra os resultados obtidos para a correlação dos 50% vaporizados com o uso de redes neurais, mostrando uma correlação razoável entre os valores experimentais e o modelo, e apresentando um coeficiente de correlação de 0,8844.

FIGURA 3-20 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR RN PARA 50 % VAPORIZADOS



A TABELA 3-14, a TABELA 3-15 e a TABELA 3-16 mostram, respectivamente, o peso das entradas para os neurônios ocultos e os pesos dos neurônios ocultos para a saída e também a sensibilidade de entrada de cada neurônio.

TABELA 3-14 — PESOS DOS NEURÔNIOS ENTRADA DA MELHOR RN 50% VAPORIZADOS

Entrada	Peso para Cada Neurônio			
	01	02	03	04
TI-01	1,21086	-0,35028	0,46919	0,23027
TI-06	-0,24639	-0,07214	0,16690	-0,09428
TI-07	-0,27342	-0,50224	-0,65827	0,33068
TI-09	0,53952	0,19790	0,42519	0,35972
FIC-03	0,67381	0,31087	0,59462	0,12163
FIC-04	0,32508	-0,08613	-0,12016	-0,74644
FIC-05	0,11792	0,24438	-0,47601	-0,61102
FIC-06	-0,22256	0,03783	-0,06040	-0,42334
FIC-10	-0,35772	0,51458	1,66783	0,33432
PY-01	-0,46585	0,06692	0,09186	0,54457
FFI-02	-1,61073	-0,09195	0,63992	0,50789
Bias	-0,56437	0,33538	0,33824	-1,71362

TABELA 3-15 — PESOS DOS NEURÔNIOS INTERMEDIÁRIOS DA MELHOR RN 50% VAPORIZADOS

Entrada	Peso
01	-0,69468
02	0,52043
03	0,27904
04	0,89006
Bias	0,12172

TABELA 3-16 — ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DA MELHOR RN PARA 50% VAPORIZADOS

Variável	Sensibilidade
TI-01	1,534348
TI-06	7,727802
TI-07	1,059184
TI-09	1,649623
FIC-03	1,121455
FIC-04	1,037006
FIC-05	1,478043
FIC-06	7,42659
FIC-10	1,026853
PY-01	3,810394
FFI-02	2,081699

3.4.4. Temperatura 70% Vaporizados

3.4.4.1. Matriz de Correlação

A TABELA 3-17 mostra os valores obtidos de significância de cada uma das variáveis em relação aos 70% vaporizados, sendo que as variáveis em *itálico* correspondem à variáveis com significância a $r < 0,05000$ para um universo de 59 pontos.

TABELA 3-17 — MATRIZ DE CORRELAÇÃO PARA 70% VAPORIZADOS

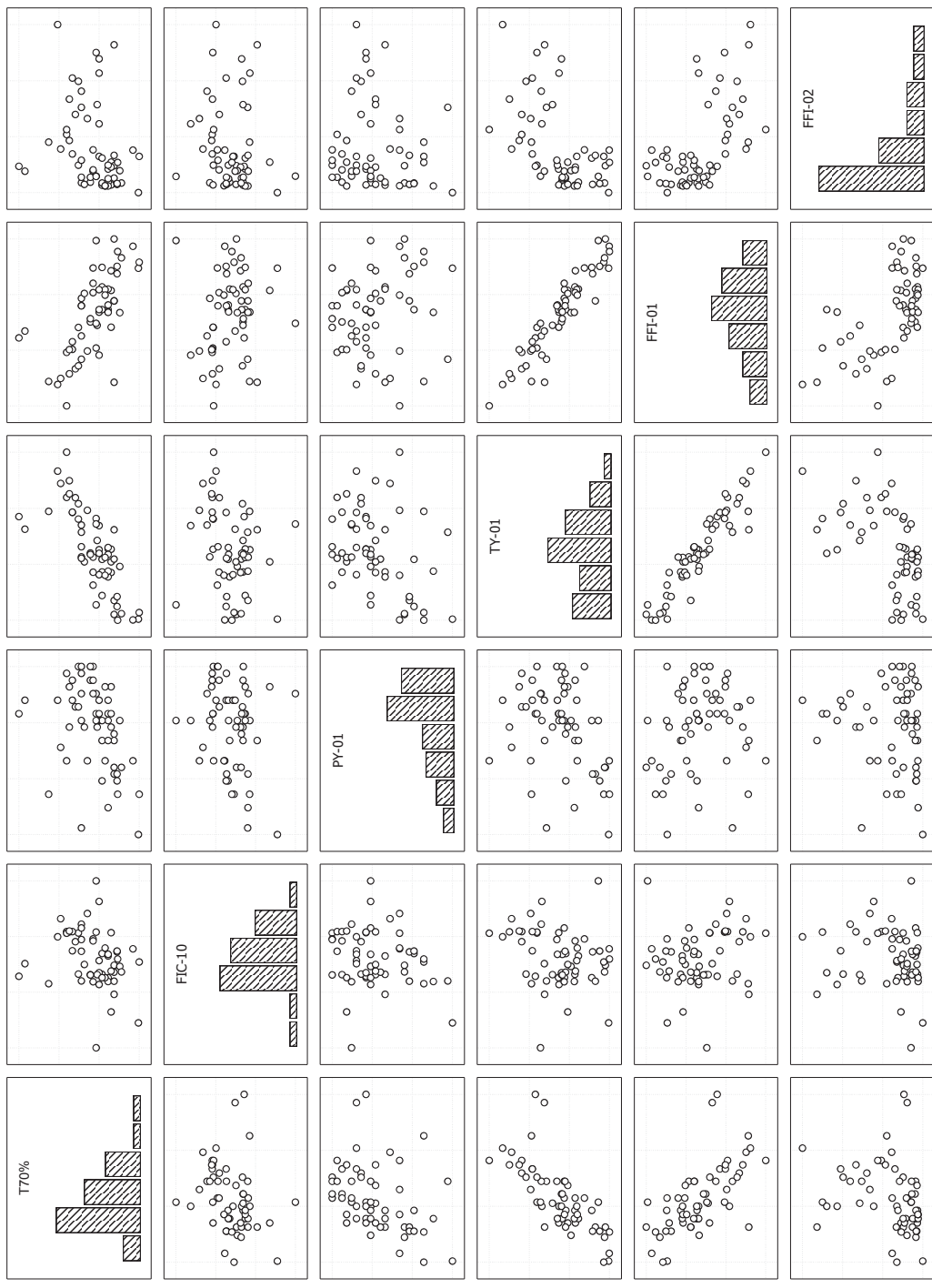
Variável de Processo	R ²
TI-01	0,06
TI-02	0,76
TI-03	0,09
TI-04	0,22
TI-05	0,42
TI-06	0,56
TI-07	0,10
TI-08	-0,16
TI-09	-0,22
TI-10	0,06
FIC-03	0,27
FIC-04	0,41
FIC-05	0,29
FIC-06	0,09
FIC-10	0,26
PY-01	0,38
TY-01	0,74
FFI-01	-0,65
FFI-02	0,27

Na sequência conforme FIGURA 3-21 e FIGURA 3-22, temos os gráficos matriciais para os dados de maior significância estatística baseado na premissa detalhada acima. Nota-se a partir deste momento uma dispersão maior dos dados e uma perda de linearidade das variáveis que usualmente apresentavam comportamento bastante linear com a destilação, como por exemplo, a temperatura da calha e o rendimento de LCO.

FIGURA 3-21 – GMDMS – CONJUNTO 01 – 70 % VAPORIZADOS



FIGURA 3-22 – GMDMS – CONJUNTO 02 – 70 % VAPORIZADOS



3.4.4.2. Correlações Lineares Avaliadas

Seguem desde a TABELA 6-31 até TABELA 6-40 os resultados obtidos através de modelos lineares com todos os dados e após a identificação e retirada dos outliers comuns para os 70% vaporizados. O melhor modelo foi novamente o ML 04 sem outliers (dados na TABELA 6-39 que apresentou melhor correlação em praticamente toda a faixa dos 70% vaporizados, mas, mesmo assim, o coeficiente de correlação ficou sensivelmente mais baixo que os dos outros pontos de destilação, que ficaram com um R^2 acima de 0,9.

Cabe citar ainda que, mesmo com a retirada inicial dos outliers, o modelo final apresentou cerca de 2 pontos fora do intervalo de 95% de confiança, e que essa retirada destes outliers reduziu a faixa de aplicabilidade do modelo de 0 até 0,753, pois os pontos que possuíam maior destilação foram exatamente os pontos que se comportaram como outliers.

A FIGURA 3-23 mostra os valores observados versus os obtidos com o ML 04 sem outliers para 70% vaporizados, enquanto a FIGURA 3-24 mostra a curva de resíduos obtidos para o modelo selecionado. Repare no aumento significativo na dispersão dos dados em torno da reta $y = x$, causado pela maior dificuldade do modelo em prever os dados experimentais.

FIGURA 3-23 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR ML DE 70 % VAPORIZADOS

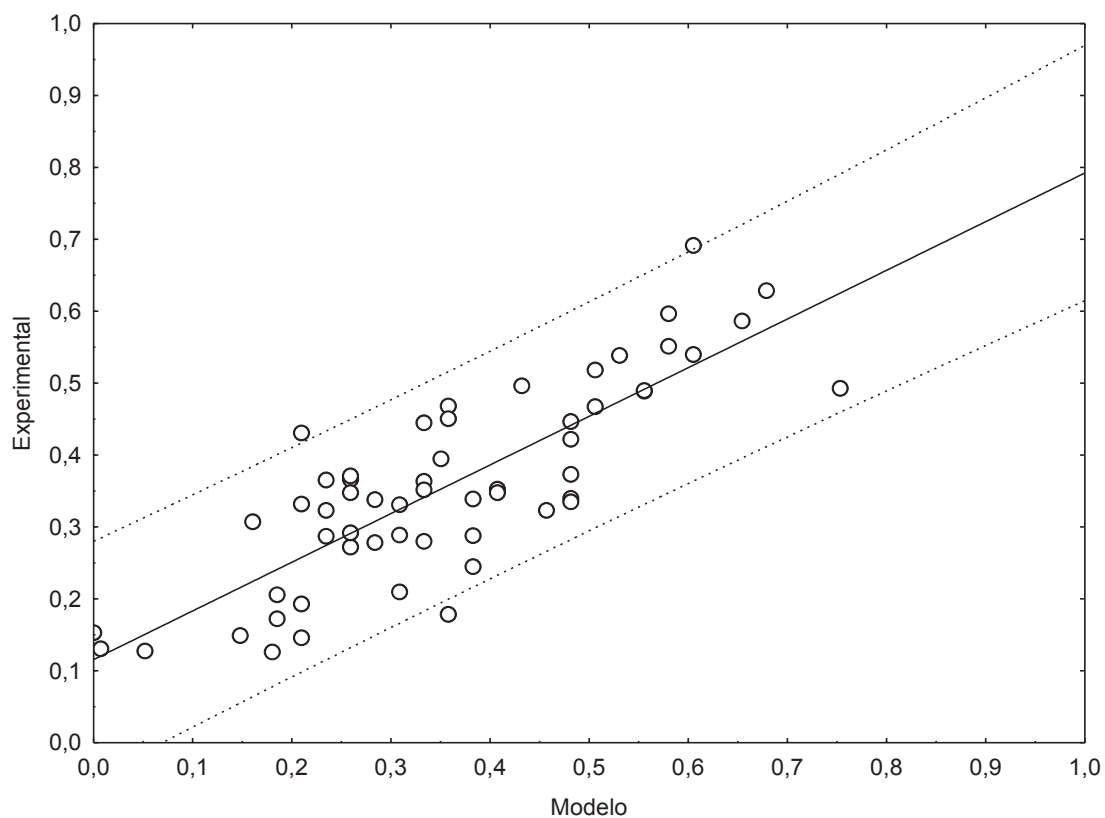
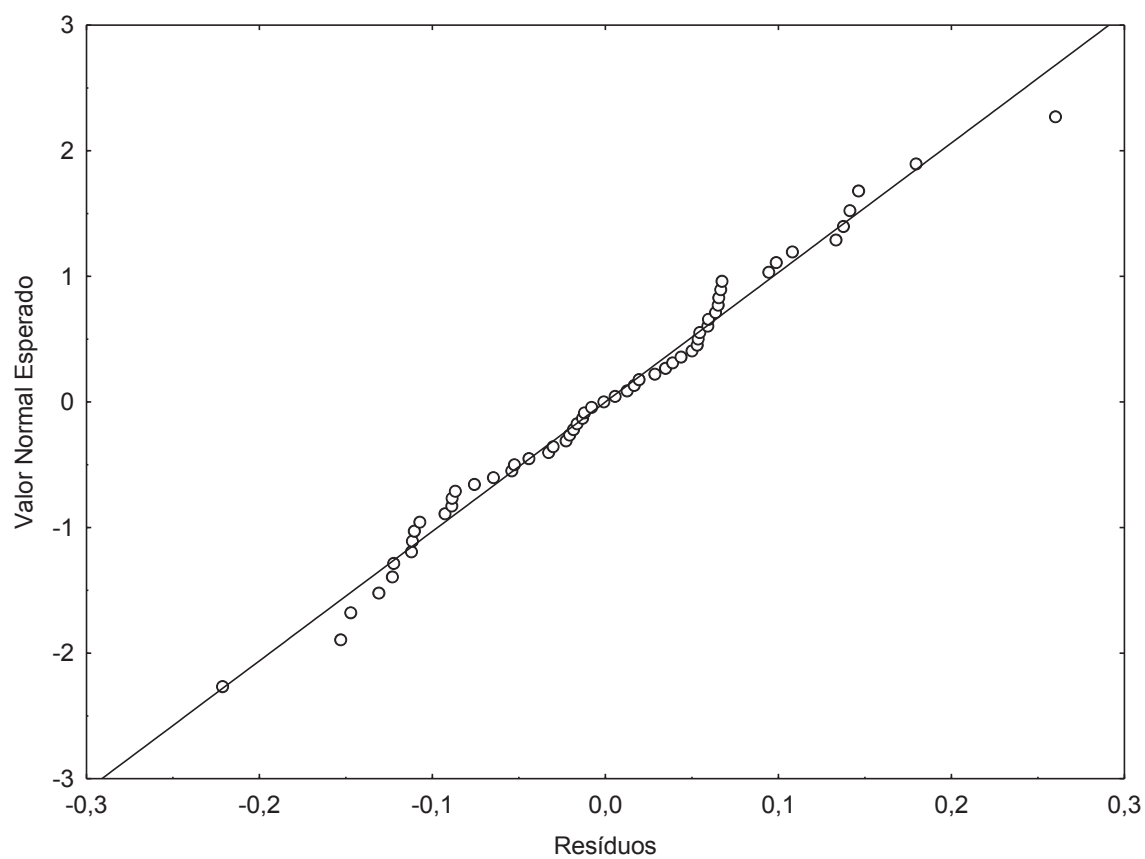


FIGURA 3-24 – CURVA DE RESÍDUOS PARA 70% VAPORIZADOS

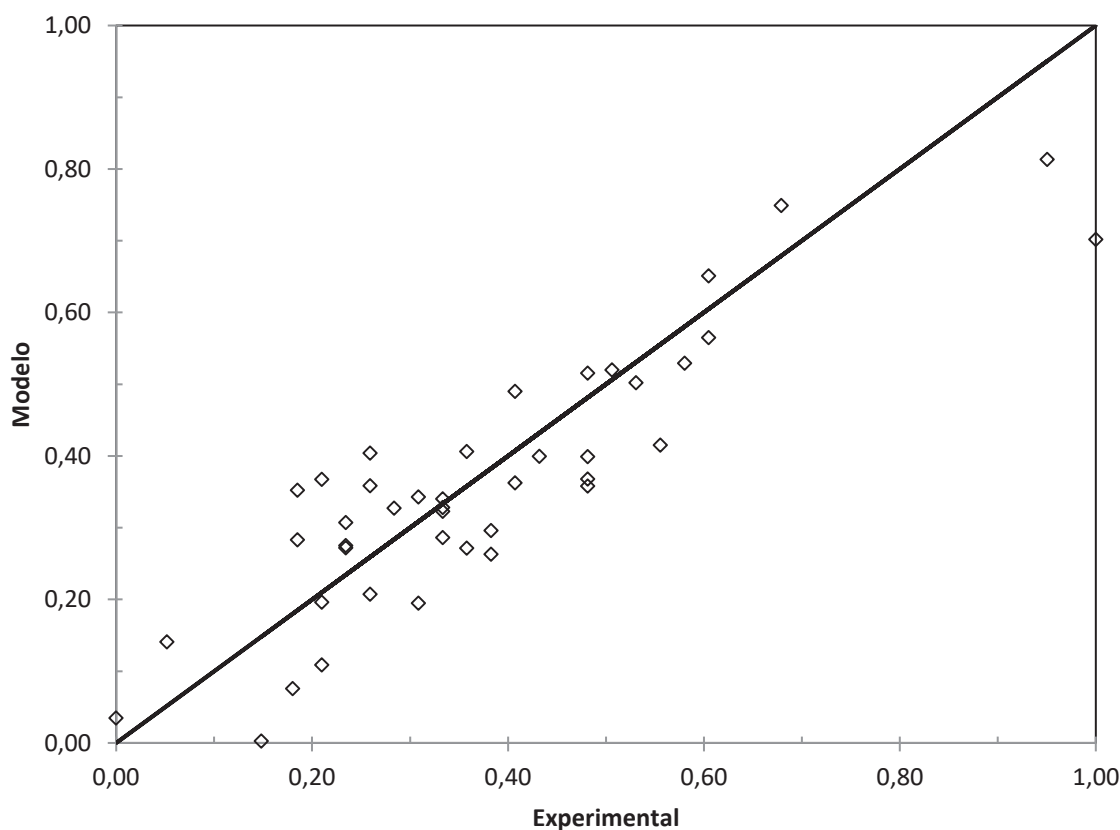


3.4.4.3. Redes Neurais Avaliadas

As redes neurais utilizadas nesta etapa seguem a metodologia descrita no início deste capítulo e estão dispostas desde a TABELA 6-68 até a TABELA 6-72.

O critério de seleção da melhor rede neural indicou que a melhor rede é a rede que está localizada em negrito e itálico na TABELA 6-71, uma rede neural do tipo RN 02 com arquitetura 11-4-1. Mesmo com a utilização de outros parâmetros, a rede ainda assim não apresentou uma performance substancialmente superior à correlação linear, apresentando um R^2 igual a 0,776 para os dados de treino com todos os pontos e um R^2 igual 0,723 excluindo os pontos do extremo, ou seja, praticamente igual à correlação linear. A FIGURA 3-25 mostra o comportamento dos dados contra o modelo.

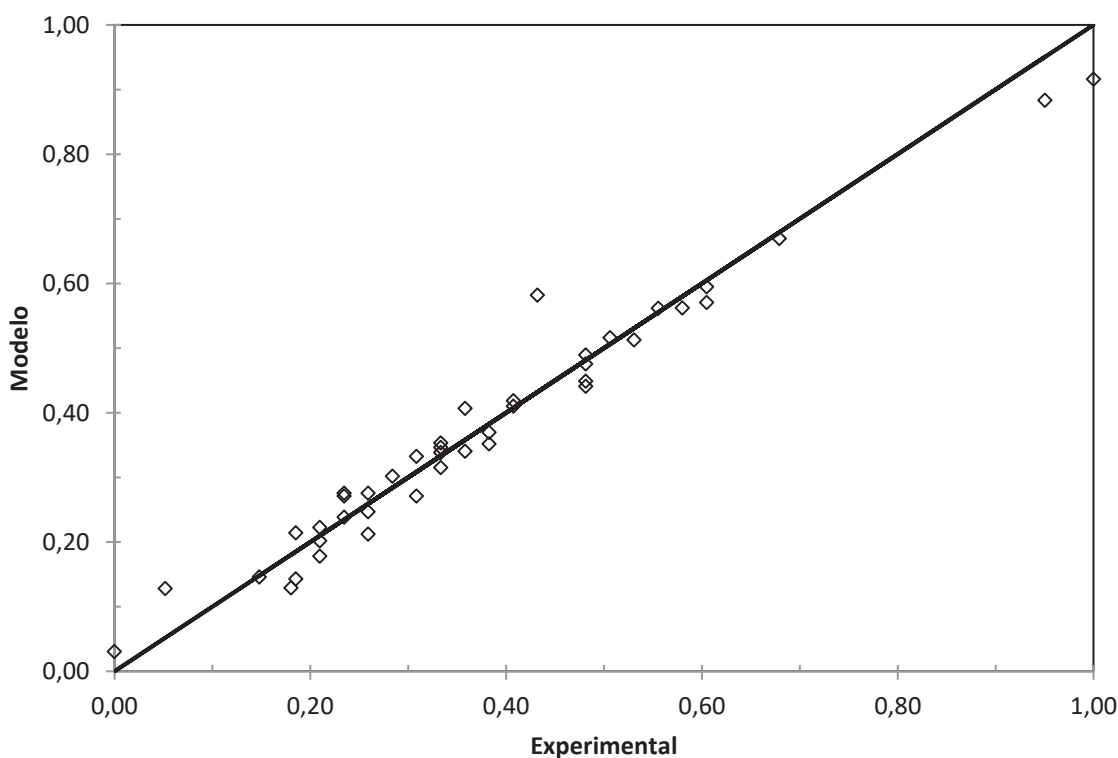
FIGURA 3-25 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR RN PARA 70 % VAPORIZADOS



Assim, para este caso, as RN 01 a 03 foram modificadas e tiveram a adição de dois novos neurônios de entrada, os 10% e o 50% vaporizados. Com a entrada destes novos neurônios, foram obtidas novas redes, mostradas desde a TABELA 6-73 até a TABELA 6-75.

O item em **negrito e itálico** na TABELA 6-75 mostra a rede selecionada. Como a performance de treino e de teste em praticamente todas as redes modificadas ficou bastante próxima, foi selecionada a rede com menor número de parâmetros, neste caso a RN 03 modificada. A FIGURA 3-26 mostra os resultados obtidos a partir desta rede, ao qual se verifica um excelente coeficiente de correlação de 0,964 entre o 70% vaporizados experimental e o obtido com a rede neural. Entretanto, cabe reiterar que a entrada dos 10% e dos 50% vaporizados não é um valor obtido em planta, e desta forma é possível que no momento que esta inferência seja utilizada tenhamos uma pequena perda de precisão devido ao uso de outros modelos para a inferência dos 10 e 50% vaporizados.

FIGURA 3-26 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR RN MODIFICADA PARA 70 % VAPORIZADOS



A TABELA 3-18 e a TABELA 3-19 mostram, respectivamente, os pesos dos neurônios obtidos após o processo de treinamento para a camada oculta e para a camada de saída. Já a TABELA 3-20 mostra a análise de sensibilidade para a rede selecionada. Repare que o peso das variáveis de destilação é muito maior que o peso das variáveis de processo, daí a importância de se utilizar correlações com grau de precisão suficientemente grande para a obtenção de valores inferenciados de 70% da ordem de grandeza dos valores experimentais.

TABELA 3-18 — PESOS DOS NEURÔNIOS ENTRADA DA MELHOR RN MODIFICADA DE 70% VAPORIZADOS

Entrada	Peso para Cada Neurônio		
	01	02	03
10%	-0,40246	-0,34920	-0,35572
50%	-0,76487	-0,00445	-0,98067
TI-02	-0,14836	0,39582	-1,37386
FFI-01	2,48612	-0,06484	0,31930
Bias	-0,90813	0,91120	-1,77672

TABELA 3-19 — PESOS DOS NEURÔNIOS INTERMEDIÁRIOS DA MELHOR RN MODIFICADA DE 70% VAPORIZADOS

Entrada	Peso
01	-2,05359
02	-0,37536
03	2,15035
Bias	0,43062

TABELA 3-20 — ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DA MELHOR RN PARA 70% VAPORIZADOS

Variável	Sensibilidade
10%	10,41583
50%	90,1153
TI-02	1,154497
FFI-01	2,590158

3.4.5. Temperatura 90% Vaporizados

3.4.5.1. Matriz de Correlação

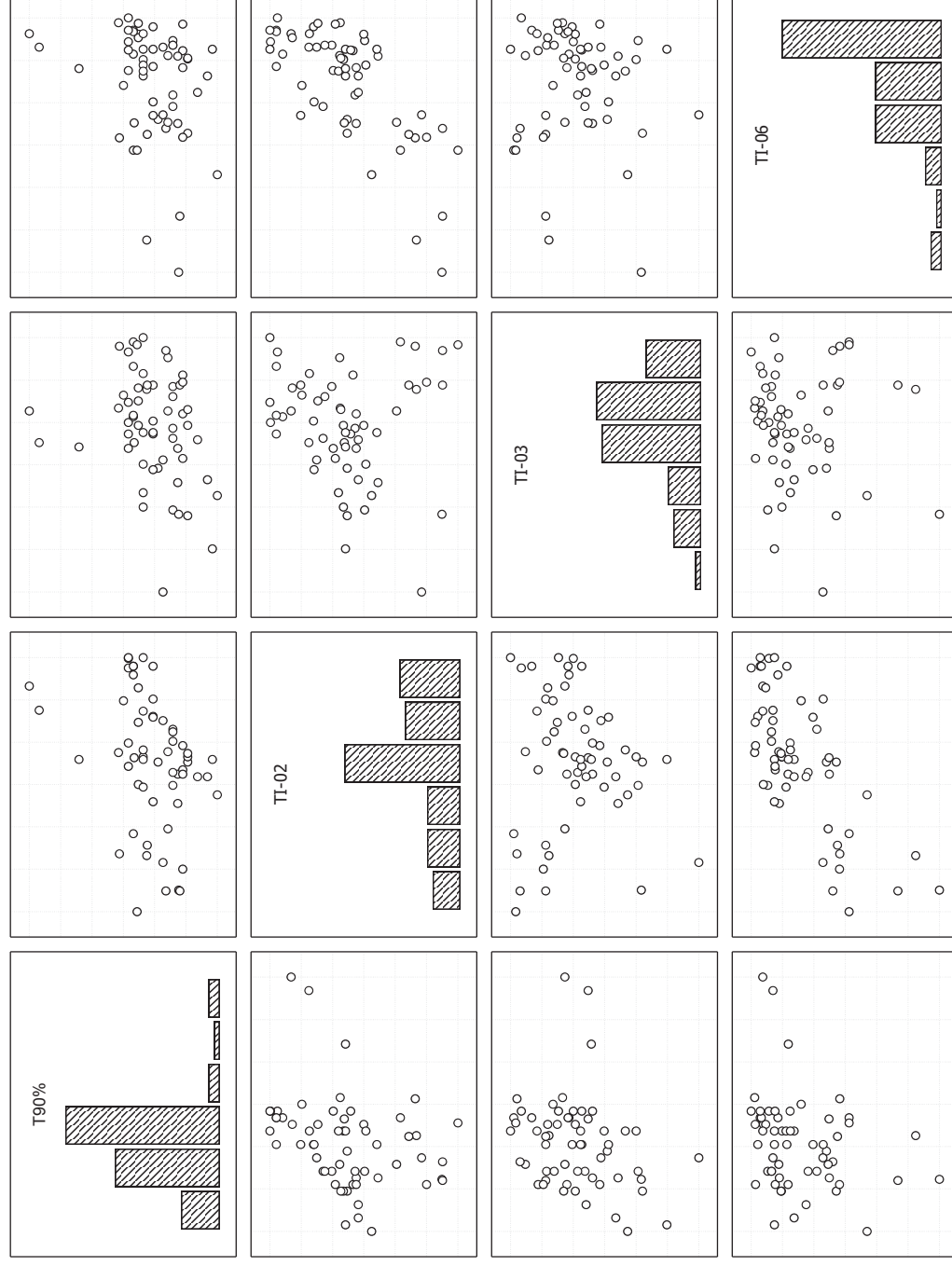
A TABELA 3-21 mostra os valores obtidos de significância de cada uma das variáveis em relação aos 90% vaporizados, sendo que as variáveis em *itálico* correspondem à variáveis com significância a $r < 0,05000$ para um universo de 59 pontos.

TABELA 3-21 — MATRIZ DE CORRELAÇÃO PARA 90% VAPORIZADOS

Variável de Processo	R ²
TI-01	-0,04
TI-02	0,33
TI-03	0,27
TI-04	0,02
TI-05	0,08
TI-06	0,26
TI-07	-0,01
TI-08	0,03
TI-09	-0,16
TI-10	0,21
FIC-03	0,14
FIC-04	0,05
FIC-05	0,22
FIC-06	-0,01
FIC-10	0,15
PY-01	0,17
TY-01	0,25
FFI-01	-0,15
FFI-02	-0,03

O gráfico matricial montados para avaliar a forma que cada uma das variáveis independentes se comporta com a variável dependente estão dispostos na FIGURA 3-27 mostram as correlações entre as variáveis de maior significância. Atentar ao fato que para os 90% vaporizados o número de variáveis que possuíam correlação caiu drasticamente, e mesmo as variáveis físicas que possuíam forte correlação tiveram uma queda bastante significativa, como a temperatura da calha e a temperatura corrigida da calha.

FIGURA 3-27 – GMDMS – 90 % VAPORIZADOS



3.4.5.2. Correlações lineares avaliadas

Os resultados obtidos para os modelos lineares indicaram uma fraca correlação entre as variáveis selecionadas entre os ML 01 ao ML 05 com o 90% vaporizado, com coeficientes de correlação baixos, conforme dados disponíveis desde a TABELA 6-41 até a TABELA 6-45. Mesmo com a retirada dos outliers comuns não se obteve uma melhora significativa no modelo linear, conforme podemos ver entre a TABELA 6-46 e a TABELA 6-50.

Logo, a alternativa proposta para a este caso, com base no que foi relatado para os 70% vaporizados, foi de propor dois novos modelos específicos para os 90% vaporizados. As equações que descreve estes modelos são as seguintes:

$$TX\%_{Corr06} = b_0 + b_1 \cdot (T10\%) + b_2 \cdot (T50\%) + b_3 \cdot (TI-02) + b_4 \cdot (FFI-01) \quad \text{Equação 3-8}$$

$$TX\%_{Corr07} = b_5 + b_6 \cdot (T10\%) + b_7 \cdot (T50\%) + b_8 \cdot (TY-01) + b_9 \cdot (FFI-01) \quad \text{Equação 3-9}$$

Onde T10% é a temperatura 10% vaporizados, T50% é a temperatura 50% vaporizados, TI-02, TY-01 e FFI-01 correspondem às variáveis de processo e b_0 à b_9 correspondem às constantes que serão ajustadas. A partir deste ponto, vamos nos referir ao modelo obtido via Equação 3-8 como ML 06 e o obtido via Equação 3-9 como ML 07.

O melhor modelo linear obtido para a inferência dos 90% vaporizados foi o ML 07, cujos resultados dos coeficientes estão disponíveis na TABELA 6-52. Embora este modelo tenha se apresentado muito melhor que o anterior, ele ainda apresenta um desvio relativamente grande quando comparado com os resultados experimentais, o que dificulta o uso prático deste modelo, conforme podemos ver na FIGURA 3-28 e FIGURA 3-29.

FIGURA 3-28 – VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR ML DE 90 % VAPORIZADOS

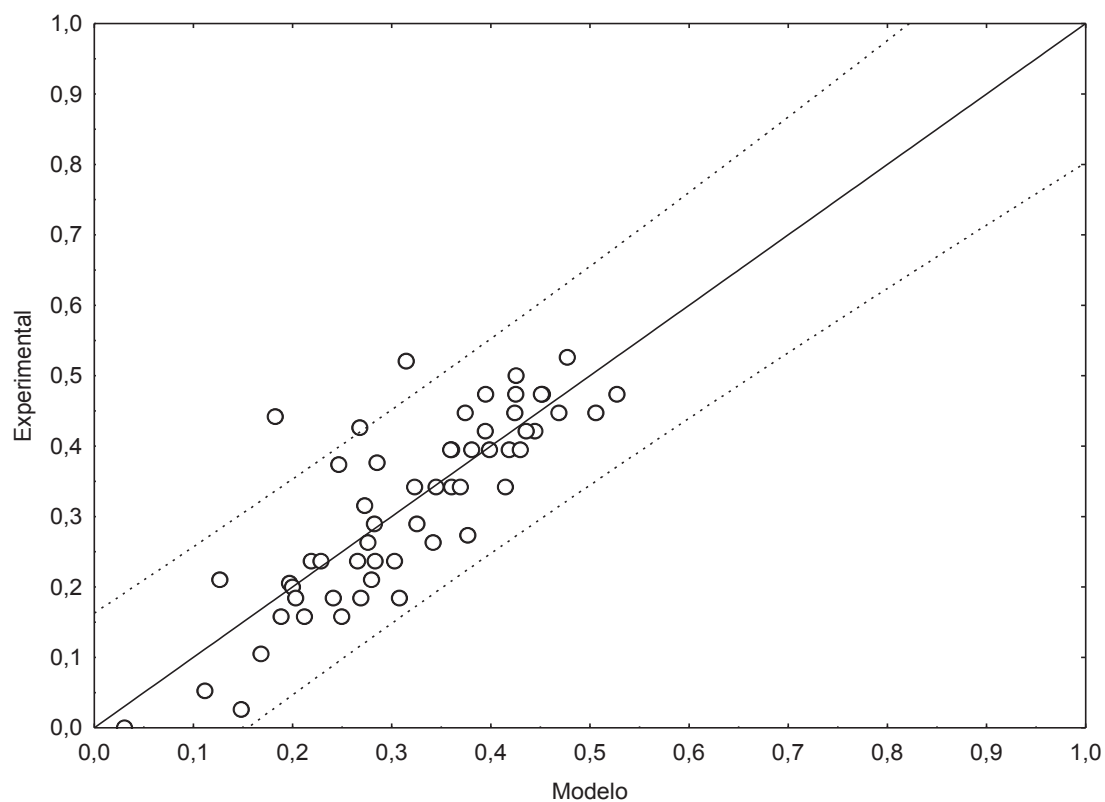
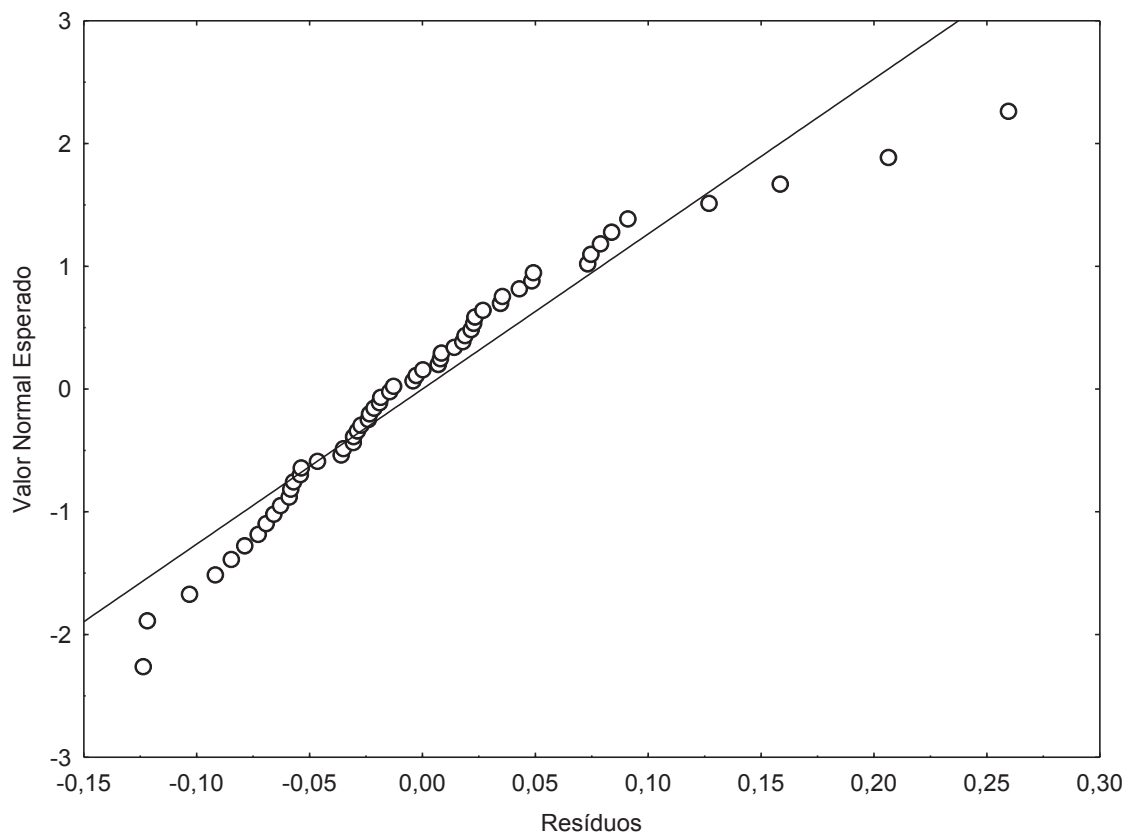


FIGURA 3-29 – CURVA DE RESÍDUOS PARA 90 % VAPORIZADOS

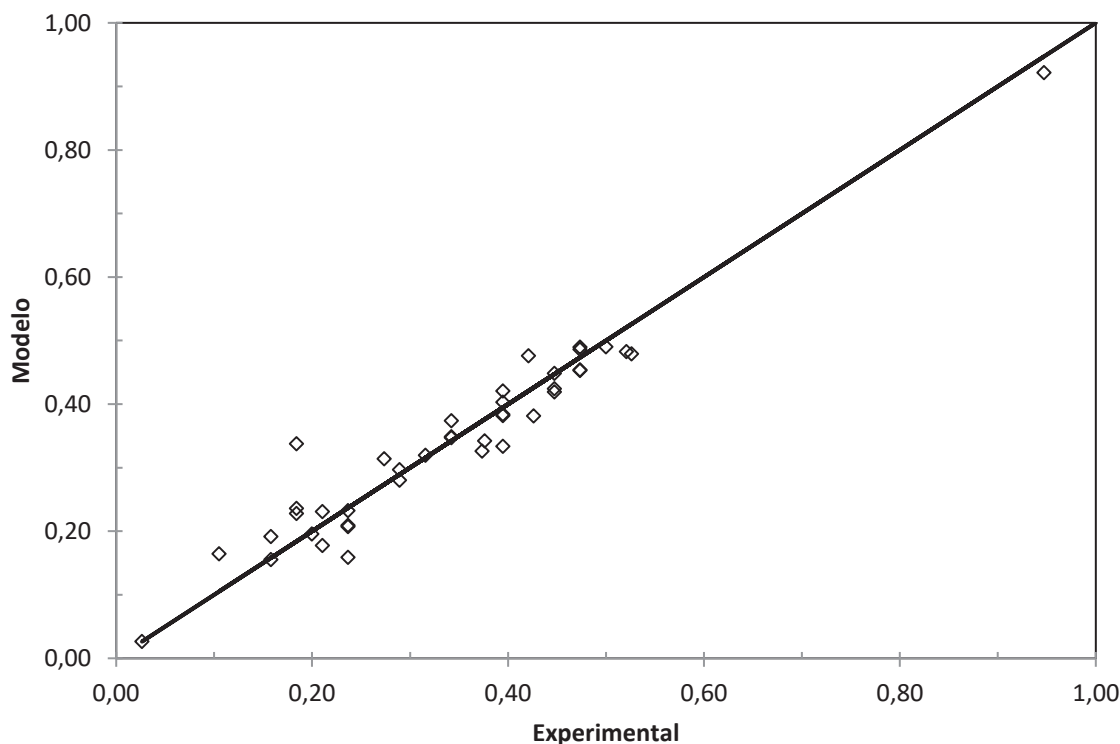


3.4.5.3. Redes Neurais Avaliadas

Um resumo das melhores arquiteturas obtidas para a modelagem dos 90% vaporizados está disponível no Anexo deste trabalho desde a TABELA 6-76 até a TABELA 6-83. Novamente pelo fato de termos incorrido na obtenção de baixas correlações para todos os tipos de entradas usuais, optou-se novamente por utilizar o 10% e o 50% vaporizados para a correlação dos 90%, tendo novamente uma melhora significativa no resultado obtido, porém condicionada ao uso de modelos inferenciais auxiliares para o cálculo dos 90% vaporizados.

A rede selecionada para representar os 90% vaporizados está indicada na TABELA 6-81. Trata-se de uma rede com arquitetura 10-4-1 e que apresentou nos resultados de teste um coeficiente de correlação de 0,954. A FIGURA 3-30 mostra a comparação entre os resultados obtidos através do modelo e os resultados obtidos em planta.

FIGURA 3-30 — VALORES PLANTA VS. MODELO PARA MELHOR RN PARA 90% VAPORIZADOS



A TABELA 3-21, a TABELA 3-22 e a TABELA 3-24 mostram, respectivamente, o peso das entradas para os neurônios ocultos e os pesos dos neurônios ocultos para a saída e também a sensibilidade de entrada de cada neurônio.

TABELA 3-22 — PESOS DOS NEURÔNIOS ENTRADA DA MELHOR RN 90% VAPORIZADOS

Entrada	Peso para Cada Neurônio			
	01	02	03	04
10%	-0,02042	-0,14413	-0,35343	0,92073
50%	0,40535	0,63514	0,14757	-0,61793
TI-03	-0,27978	0,39644	0,76469	-0,44425
TI-05	-0,96964	0,28502	-0,08230	0,39598
FIC-04	0,26266	0,32134	-0,89156	-0,05518
FIC-06	0,84950	0,56863	-0,29342	-0,38225
PY-01	-0,94935	-0,13215	-0,29341	-0,25013
TY-01	-0,20351	-1,27152	-0,49414	1,69163
FFI-01	-0,85270	0,51765	-0,15192	0,56966
FFI-02	0,10995	0,14894	-0,05397	-0,18908
Bias	-0,72352	-0,52922	0,50341	-1,10456

TABELA 3-23 — PESOS DOS NEURÔNIOS INTERMEDIÁRIOS DA MELHOR RN 90% VAPORIZADOS

Entrada	Peso
01	-0,89633
02	-0,84656
03	-0,71735
04	1,37760
Bias	0,03983

TABELA 3-24 — ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DA MELHOR RN PARA 90% VAPORIZADOS

Variável	Sensibilidade
10%	50,79961
50%	94,40433
TI-03	1,751815
TI-05	2,561022
FIC-04	2,168193
FIC-06	2,286012
PY-01	1,133405
TY-01	13,18631
FFI-01	15,92799
FFI-02	2,357708

4. CONCLUSÕES

Com base nos resultados obtidos, verifica-se que as metodologias aplicadas produziram inferências que poderão ser utilizadas para o controle das características do LCO, e, conseqüentemente, permitir a otimização dos tempos de campanha das unidades e garantir a produção de diesel com baixo teor de enxofre.

Entretanto, cabe citar que resultados bem diferentes foram obtidos conforme o percentual vaporizado fosse mais alto. Até os 50% vaporizados as correlações lineares produziram resultados aceitáveis do ponto de vista industrial; entretanto, e a partir dos 70% vaporizados a correlação do modelo com os dados de processo caiu significativamente. Por outro lado, a rede neural, apesar de praticamente sempre produzir correlações superiores às correlações lineares em todos os pontos, mostrou uma performance ligeiramente superior às correlações lineares nos 10% e 30%, o que reduz sua aplicabilidade pois a implementação de uma correlação linear no SDCCD é infinitamente mais fácil, e somente foi atrativa para os casos dos 70 e 90% vaporizados, e ainda assim utilizando os dados de 10 e 50% vaporizados.

Em relação ao percentual de dados de treino / teste para as redes neurais, aparentemente a relação 70/30 foi a que produziu melhores resultados, o que na prática pode ser uma inverdade. Na prática, parece ser mais importante escolher um bom número de pontos com maior variabilidade possível do que se importar em demasiado com o tamanho do treino / teste.

Nos casos utilizados, o uso das temperaturas corrigidas realmente apresentou alguma melhora em relação às correlações puras e simples com a temperatura da calha; entretanto, as melhoras correlações não são absurdamente maiores que as correlações com as variáveis. Isso se deve provavelmente à natureza da correção, pois se levarmos em contas as simplificações colocadas ao modelo (calor de vaporização e peso molar constante, gás ideal, etc.) provavelmente o modelo deverá ter melhor ajuste, com um aumento considerável da complexidade matemática. Além disso, se a pressão total da unidade não variar, acredito que valha mais a pena utilizar diretamente a temperatura do que a temperatura corrigida porque o número de instrumentos envolvidos para o cálculo de uma temperatura corrigida é muito maior

(principalmente para este caso onde as pressões parciais tem de ser calculadas no meio da coluna), e conseqüentemente a possibilidade de falha de um deles e perda do cálculo é muito maior.

Desta forma, o modelo dos 90% vaporizados (o que será utilizado no controle) deverá ficar bem complexo, com uma rede dos 90% alimentada por uma correlação linear (para os 10% vaporizados) e uma outra rede alimentando a entrada dos 50%. Com isso, teremos uma arquitetura híbrida correlação linear / rede neural que em hipótese deverá garantir bons resultados ao sensor virtual.

Os resultados obtidos, apesar de ainda carecerem de uma validação na planta para mostrar que realmente estão aderentes com os resultados obtidos na planta, mostraram que é possível sim obter bons resultados utilizando-se de regras gaussianas, desde que sejam escolhidas adequadamente as variáveis de entrada. Esta é talvez a principal necessidade para o desenvolvimento de sensores virtuais, e infelizmente a seleção destas variáveis depende principalmente do conhecimento e expertise do funcionamento da planta. Ainda, a discussão a respeito do uso de princípios fundamentais e estatística é válida, mas duas perguntas deverão ser feitas: primeiro, se realmente a planta irá modificar profundamente seu *modus operandi*, e segundo o tempo gasto para o desenvolvimento de uma inferência mais rigorosa. Se as condições de processo historicamente não forem muito diferentes, acredito que não valha a pena partir para modelos rigorosos, ou, numa hipótese mais conservadora, é possível numa etapa inicial utilizar modelos estatísticos e seguir futuramente para modelos rigorosos ou semi-rigorosos.

5. REFERÊNCIAS

- [1] HYDROCARBON PROCESSING. **2008 Refining Processes Handbook**. Houston, Texas: Gulf Publishing Company, 2008. 1 CD ROM.
- [2] FAUDI GAMBH. **Fully automatic Backflush Filter Type RSF 30**. Disponível em: < http://www.faudi.de/downloads/user/FAU-DRU-204-Rueckspuelfilter_engl.pdf> Acesso em: 22 jan. 2010.
- [3] GURJAR, A. Choosing a hydroprocessing scheme. **PTQ**, Hopesay, v. 15, n. 5, p. 71-77, jan./mar. 2010.
- [4] DACRO Industries Inc. – Project Gallery. **Final Assembly of this 700 ton Hydrotreating Reactor was completed in Dacro's shop and delivered to a local refinery**. Alberta, 2011. Disponível em: <<http://www.dacro.com/project-gallery/>> Acesso em: 6 fev. 2011.
- [5] DIESEL NET. **Fuel Regulations: European Union**. Disponível em: <<http://www.dieselnat.com/standards/eu/fuel.php>> Acesso em: 8 fev. 2011.
- [6] ARANGO, J. H. Calidad de los combustibles en Colombia. **Revista de Ingeniería**, Bogotá, Colômbia, n. 29, p. 100-108 abr./jun. 2009.
- [7] EPA. **Regulatory Announcement: Light-Duty Diesel Tier 2 Amendments**, mar. 2006. Disponível em: < <http://www.epa.gov/tier2/amendments/420f06027.htm>> Acesso em: 12 fev. 2011.
- [8] ESTADO DE S. PAULO. **Governo recua e autoriza diesel com 1800 ppm de enxofre**. out. 2008. Disponível em: <<http://www.estadao.com.br/noticias/vidae,governo-recua-e-autoriza-diesel-com-1800-ppm-de-enxofre,269821,0.htm>> Acesso em: 13 fev. 2011.
- [9] CALDAS, F.; PEREIRA, M. F. N.; GONÇALVES, R.C.L. **Panorama Atual e Perspectivas de Produção e Qualidade dos Combustíveis**. Rio de Janeiro: UERJ, [2000-?]. p. 25.
- [10] BJORKLUND, B. L. et al. **The Lower It Goes, The Tougher It Gets (The Practical Implications Of Producing Ultra-Low Sulfur Diesel)** 2000. Trabalho apresentado nos 2000 NPRA Annual Meeting, EUA, 2000.

- [11] TAILLEUR, R. G. et al. **Catalyst for ultra-low sulfur and aromatic diesel.** Applied Catalysis, 2005.
- [12] LI, X. WANG, A.; EGOROVA, M. Kinetics of the HDS of 4,6-dimethyldibenzothiophene and its hydrogenated intermediates over sulfided Mo and NiMo on γ -Al₂O₃ **Journal of Catalysis**, New York, v. 250, n. 2, p. 283-293, set. 2007.
- [13] RAJGURU, A. et al. Revamp for Ultra-Low Sulfur Diesel with countercurrent Reactor. **Annual Meeting NPRA**, 2004.
- [14] SONG, C.; MA, X. **New design approaches to ultra-clean diesel fuels by deep desulfurization and deep dearomatization.** Applied Catalysis B: Environmental, v. 41, p. 207-238. 2003c.
- [15] SONG, C. An overview of new approaches to deep desulfurization for ultra-clean gasoline, diesel fuel and jet fuel. Catalysis Today, v. 86, p. 211-263. 2003.
- [16] TORRISI, S. et al. Best Practices for producing ultra-low sulphur diesel. **PTQ**, Hopesay, v. 15, n. 5, p. 71-77, jun./ago. 2002.
- [17] TORRISI, S.; REMANS, T.; SWAIN, J. The Challenging Chemistry of Ultra-Low-Sulfur Diesel. **World Refining**, Houston, dez. 2010.
- [18] CHOI, K., KORAI, Y. MOCHIDA, I. **Possible Ways to Achieve Deep HDS of Light Cycle Oil** Americal Chemical Society, Division Fuel Chemistry, v. 48(2), p. 653-654, 2003.
- [19] CRITERION, **Technical Bulletin:** Criterion General Guidelines for Diesel Washing in Hydrotreaters May 2005. Disponível em: <[http http://www-static.shell.com/static/criterion/downloads/pdf/dslwash_tb.pdf](http://www-static.shell.com/static/criterion/downloads/pdf/dslwash_tb.pdf)>. Acesso em: 20 set. 2011.
- [20] FORTUNA, L. et al. **Soft Sensors for Monitoring and Control of Industrial Processes.** 1st Edition London: Springer, 2006. 270 p.
- [21] THAM, M. T. et al. Soft Sensors for Process Estimation and Inferential Control **Journal of Process Control**, v. 1, p. 3, jan. 1991.

- [22] SILVESTRE, D. S.. **Inferência da Curva de Destilação ASTM da Destilação Atmosférica para Controle Avançado**. 2005. 106 f. Dissertação (Graduação) - UFSC, Florianópolis, 2005.
- [23] ANSARI, R. M.; AL-OTAIBI, J. A.. **An Innovative Approach to Inferential Modeling on Crude Distillation Unit**. Saudi Aramco Journal Of Technology, Riad, p. 26-30, jul. 2007.
- [24] LIU, J.; SRINIVASAN, R.; SELVAGURU, P. N.. Practical Challenges In Developing Data-Driven. In: EUROPEAN SYMPOSIUM ON COMPUTER AIDED PROCESS ENGINEERING, 18., 2008, Lyon. **18th European Symposium on Computer Aided Process Engineering**. London: Elsevier, 2008. p. 961-966.
- [25] SHAH, K.; GOEL, S.. Simple Techniques for Generation Process Control Inferentials. **Hydrocarbon Processing**, Houston, p. 81-84, 20 out. 2005.
- [26] FRIEDMAN, Y.Z. Choosing Inferential Modeling Tools. **Hydrocarbon Processing**, Houston, 20 out. 2005.
- [27] KING, M.J. How to lose money with inferential properties, **Hydrocarbon Processing**, Houston, out. 2004.
- [28] GUIVER, J. Applying Neural Networks **Hydrocarbon Processing** Houston, January, 1998.
- [29] FAUSETT, L. V.. **Fundamentals of Neural Networks**. 1st Edition New York: Prentice Hall, 1994. 461 p.
- [30] LUDWIG JUNIOR, O.; COSTA, E. M. M.. **Redes Neurais: Fundamentos e Aplicações com Programas C**. Rio de Janeiro: Ciência Moderna, 2007. 125 p.
- [31] BRAGA, A. P.; CARVALHO, A. P. de L. F. de; LUDERMIR, T. B. **Redes Neurais Artificiais: Teoria e Aplicações**. Rio de Janeiro: LTC, 2000. 262 p.
- [32] HOLDERBAUM, W.; CANART, R.; BORNE, P. **Artificial Neural Networks Application to Boolean Input Systems Control**. Disponível em: <http://sic.ici.ro/sic1999_2/art03.html>. Acesso em: 29 set. 2011.

[33] ANDRETTA, Marina. **Métodos Quase-Newton**. Disponível em: <<http://www.icmc.usp.br/~andretta/ensino/aulas/sme0212-2-10/quasenewton.pdf>>. Acesso em: 29 set. 2011.

[34] HAYKIN, S. **Redes Neurais: Princípio e Prática**. 2. ed. São Paulo: Artmed Editora, 1999. 900 p.

[35] MORAN, M. J.; SHAPIRO, H.N. **Princípios de Termodinâmica para Engenharia**. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002. 681 p.

[36] SOUZA, A.M.. **Correlação Linear Simples**. Disponível em: <<http://w3.ufsm.br/adriano/aulas/coreg/Aula%2001%20Correlao%20Linear.pdf>>. Acesso em: 2 out. 2011.

[37] FROZZA, E.; LUZ JR., L.F. de L.. Elaboração de Modelo de Inferência para Controle de Unidade de Destilação Atmosférica de Petróleo. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE PETRÓLEO E GÁS, 3., 2005, Salvador. **Anais...** Natal: ABPG, 2005. Disponível em: <http://www.portalabpg.org.br/PDPetro/3/trabalhos/IBP0339_05.pdf>. Acesso em: 15 mar. 2011.

[38] MIRANDA, Filipe Costa Pinto Dos Reis; LUSA, Leandro Porto. **Inferência para Controle de Uma Torre Atmosférica de uma Refinaria**. Disponível em: <http://www.trisolutions.com.br/isa/ISAShow_2003_InferenciasTorreAtm_Recap.pdf>. Acesso em: 2 out. 2011.

[39] FRIEDMAN, Y.Z. More About Inferential Control Models, **Hydrocarbon Processing**, Houston, p.17-18, 3 fev. 2005.

[40] DYMINSKI, A. S.. **Redes Neurais de Múltiplas Camadas**. Disponível em: <http://www.cesec.ufpr.br/docente/andrea/TC747_files/RNAula05.pdf>. Acesso em: 3 ago. 2011.

6. ANEXOS

ANEXO A – CORRELAÇÕES LINEARES: RESULTADOS

Observação: os coeficientes com significância estatística estão mostrados em negrito e *itálico* e correspondem aos valores cujo desvio padrão é menor que o valor do coeficiente.

TABELA 6-1 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 10% VAPORIZADOS

Modelo Linear 01	$T10\%_{Corr01} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 = 0,492951$	$sa_0 = 0,061415$	$R = 0,9565 / R^2 = 0,9150$
$a_1 = 0,532042$	$sa_1 = 0,054753$	$\Sigma e^2 = 0,2816$
$a_2 = -0,45122$	$sa_2 = 0,058622$	$F_{obs}(2,56) = 301,36$

TABELA 6-2 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 10% VAPORIZADOS

Modelo Linear 02	$T10\%_{Corr02} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (PY-01) + a_3 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 = 0,463781$	$sa_0 = 0,064737$	$R = 0,9582 / R^2 = 0,9177$
$a_1 = 0,614139$	$sa_1 = 0,081830$	$\Sigma e^2 = 0,2727$
$a_2 = -0,075980$	$sa_2 = 0,056604$	$F_{obs}(3,55) = 204,38$
$a_3 = -0,398448$	$sa_3 = 0,070241$	

TABELA 6-3 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 10% VAPORIZADOS

Modelo Linear 03	$T10\%_{Corr03} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01) + a_2 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 = 0,054044$	$sa_0 = 0,110514$	$R = 0,9534 / R^2 = 0,9089$
$a_1 = 1,063015$	$sa_1 = 0,1115696$	$\Sigma e^2 = 0,3017$
$a_2 = 0,119415$	$sa_2 = 0,115712$	$F_{obs}(2,56) = 279,4616$

TABELA 6-4 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 10% VAPORIZADOS

Modelo Linear 04	$T10\%_{Corr04} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01)$	
$a_0 = 0,166354$	$sa_0 = 0,019250$	$R = 0,9525 / R^2 = 0,9072$
$a_1 = 0,951082$	$sa_1 = 0,040291$	$\Sigma e^2 = 0,3074$
		$F_{obs}(1,57) = 557,22$

TABELA 6-5 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 10% VAPORIZADOS

Modelo Linear 05		$T10\%_{Corr05} = a_0 + a_1 \cdot (TI-03) + a_2 \cdot (TI-05) + a_3 \cdot (FIC-04) + a_4$ $\cdot (FIC-06) + a_5 \cdot (PY-01) + a_6 \cdot (TY-01) + a_7$ $\cdot (FFI-01) + a_8 \cdot (FFI-02)$		
$a_0 =$	0,000689	$sa_0 =$	0,158632	R = 0,9620 / R² = 0,9254 Σ e² =0,2472 F _{obs} (8,5) = 77,5144
$a_1 =$	-0,022995	$sa_1 =$	0,069379	
$a_2 =$	-0,046452	$sa_2 =$	0,073849	
$a_3 =$	0,109802	$sa_3 =$	0,059270	
$a_4 =$	0,179881	$sa_4 =$	0,094865	
$a_5 =$	-0,151630	$sa_5 =$	0,080569	
$a_6 =$	1,054056	$sa_6 =$	0,208164	
$a_7 =$	0,102935	$sa_7 =$	0,215404	
$a_8 =$	0,032652	$sa_8 =$	0,049177	

TABELA 6-6 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 10% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 01		$T10\%_{Corr01} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 =$	0,510623	$sa_0 =$	0,057285	R = 0,9688 / R² = 0,9385 Σ e² =0,2035 F _{obs} (2,54) = 412,3614
$a_1 =$	0,536516	$sa_1 =$	0,050431	
$a_2 =$	-0,475584	$sa_2 =$	0,054489	

TABELA 6-7 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 10% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 02		$T10\%_{Corr02} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (PY-01) + a_3 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 =$	0,480561	$sa_0 =$	0,058458	R = 0,9707 / R² = 0,9422 Σ e² =0,1915 F _{obs} (3,53) = 287,8735
$a_1 =$	0,629471	$sa_1 =$	0,070949	
$a_2 =$	-0,088697	$sa_2 =$	0,048614	
$a_3 =$	-0,417778	$sa_3 =$	0,062049	

TABELA 6-8 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 10% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 03		$T10\%_{Corr03} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01) + a_2 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 =$	0,100001	$sa_0 =$	0,104638	R = 0,9641 / R² = 0,9294 Σ e² = 0,2338 F _{obs} (2,54) = 355,4269
$a_1 =$	1,038019	$sa_1 =$	0,108508	
$a_2 =$	0,066660	$sa_2 =$	0,109932	

TABELA 6-9 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 10% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 04		$T10\%_{Corr04} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01)$
$a_0 =$	0,162580	$sa_0 =$ 0,017175
$a_1 =$	0,976082	$sa_1 =$ 0,036408
		R = 0,9638 / R ² = 0,9289
		$\Sigma e^2 = 0,2354$
		F _{obs} (1,55) = 718,7493

TABELA 6-10 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 10% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 05		$T10\%_{Corr05} = a_0 + a_1 \cdot (TI-03) + a_2 \cdot (TI-05) + a_3 \cdot (FIC-04) + a_4 \cdot (FIC-06) + a_5 \cdot (PY-01) + a_6 \cdot (TY-01) + a_7 \cdot (FFI-01) + a_8 \cdot (FFI-02)$
$a_0 =$	0,113889	$sa_0 =$ 0,143732
$a_1 =$	0,052855	$sa_1 =$ 0,064206
$a_2 =$	-0,070813	$sa_2 =$ 0,066262
$a_3 =$	0,132268	$sa_3 =$ 0,053035
$a_4 =$	0,126675	$sa_4 =$ 0,086865
$a_5 =$	-0,109096	$sa_5 =$ 0,072012
$a_6 =$	0,938143	$sa_6 =$ 0,186260
$a_7 =$	-0,066516	$sa_7 =$ 0,195121
$a_8 =$	-0,012447	$sa_8 =$ 0,044929
		R = 0,9716 / R ² = 0,9440
		$\Sigma e^2 = 0,1854$
		F _{obs} (8,48) = 101,1977

TABELA 6-11 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 30% VAPORIZADOS

Modelo Linear 01	$T30\%_{Corr01} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 = 0,513201$	$sa_0 = 0,063770$	R = 0,9521 / R ² = 0,9064
$a_1 = 0,523250$	$sa_1 = 0,056852$	$\Sigma e^2 = 0,3036$
$a_2 = -0,445297$	$sa_2 = 0,060869$	F _{obs} (2,56) = 271,1667

TABELA 6-12 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 30% VAPORIZADOS

Modelo Linear 02	$T30\%_{Corr02} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (PY-01) + a_3 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 = 0,134061$	$sa_0 = 0,033369$	R = 0,9355 / R ² = 0,8752
$a_1 = 0,916112$	$sa_1 = 0,059199$	$\Sigma e^2 = 0,4047$
$a_2 = -0,214590$	$sa_2 = 0,057661$	F _{obs} (3,55) = 128,6261
$a_3 = 0,142592$	$sa_3 = 0,048947$	

TABELA 6-13 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 30% VAPORIZADOS

Modelo Linear 03	$T30\%_{Corr03} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01) + a_2 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 = 0,116666$	$sa_0 = 0,119743$	R = 0,9438 / R ² = 0,8908
$a_1 = 1,007770$	$sa_1 = 0,125357$	$\Sigma e^2 = 0,3542$
$a_2 = 0,080584$	$sa_2 = 0,125374$	F _{obs} (2,56) = 228,4755

TABELA 6-14 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 30% VAPORIZADOS

Modelo Linear 04	$T30\%_{Corr04} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01)$	
$a_0 = 0,192455$	$sa_0 = 0,020738$	R = 0,9434 / R ² = 0,8900
$a_1 = 0,932235$	$sa_1 = 0,043405$	$\Sigma e^2 = 0,3568$
		F _{obs} (1,57) = 461,2872

TABELA 6-15 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 30% VAPORIZADOS

Modelo Linear 05		$T30\%_{Corr05} = a_0 + a_1 \cdot (TI-03) + a_2 \cdot (TI-05) + a_3 \cdot (FIC-04) + a_4 \cdot (FIC-06) + a_5 \cdot (PY-01) + a_6 \cdot (TY-01) + a_7 \cdot (FFI-01) + a_8 \cdot (FFI-02)$			
$a_0 =$	0,080780	$sa_0 =$	0,171273	R = 0,9546 / R² = 0,9112 Σ e² = 0,2881 F _{obs} (8,5) = 64,11905	
$a_1 =$	0,016604	$sa_1 =$	0,074908		
$a_2 =$	-0,125152	$sa_2 =$	0,079734		
$a_3 =$	0,145252	$sa_3 =$	0,063993		
$a_4 =$	0,040636	$sa_4 =$	0,102424		
$a_5 =$	-0,040899	$sa_5 =$	0,086989		
$a_6 =$	1,021233	$sa_6 =$	0,224752		
$a_7 =$	0,059266	$sa_7 =$	0,232569		
$a_8 =$	-0,026822	$sa_8 =$	0,053096		

TABELA 6-16 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 30% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 01		$T30\%_{Corr01} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 =$	0,537323	$sa_0 =$	0,053062	R = 0,9648 / R² = 0,9309 Σ e² = 0,2010 F _{obs} (2,54) = 363,8474
$a_1 =$	0,483129	$sa_1 =$	0,047767	
$a_2 =$	-0,460107	$sa_2 =$	0,050520	

TABELA 6-17 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 30% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 02		$T30\%_{Corr02} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (PY-01) + a_3 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 =$	0,523150	$sa_0 =$	0,056750	R = 0,9652 / R² = 0,9316 Σ e² = 0,1990 F _{obs} (3,53) = 240,6223
$a_1 =$	0,522585	$sa_1 =$	0,072445	
$a_2 =$	-0,036039	$sa_2 =$	0,049581	
$a_3 =$	-0,434875	$sa_3 =$	0,061481	

TABELA 6-18 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 30% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 03		$T30\%_{Corr03} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01) + a_2 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 =$	0,154681	$sa_0 =$	0,097829	R = 0,9603 / R² = 0,9222 Σ e² = 0,2265 F _{obs} (2,54) = 319,8853
$a_1 =$	0,946197	$sa_1 =$	0,102799	
$a_2 =$	0,042029	$sa_2 =$	0,102399	

TABELA 6-19 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 30% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 04		$T30\%_{Corr04} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01)$	
$a_0 =$	0,194225	$sa_0 =$	0,016855
$a_1 =$	0,906652	$sa_1 =$	0,035578
		R = 0,9602 / R ² = 0,9219	
		$\Sigma e^2 = 0,2272$	
		F _{obs} (1,55) = 649,4206	

TABELA 6-20 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 30% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 05		$T30\%_{Corr05} = a_0 + a_1 \cdot (TI-03) + a_2 \cdot (TI-05) + a_3 \cdot (FIC-04) + a_4$ $\cdot (FIC-06) + a_5 \cdot (PY-01) + a_6 \cdot (TY-01) + a_7$ $\cdot (FFI-01) + a_8 \cdot (FFI-02)$	
$a_0 =$	0,141617	$sa_0 =$	0,130425
$a_1 =$	0,027733	$sa_1 =$	0,056921
$a_2 =$	-0,122824	$sa_2 =$	0,060489
$a_3 =$	0,135941	$sa_3 =$	0,048851
$a_4 =$	0,153196	$sa_4 =$	0,079825
$a_5 =$	-0,115734	$sa_5 =$	0,067387
$a_6 =$	0,899379	$sa_6 =$	0,171634
$a_7 =$	-0,040981	$sa_7 =$	0,177134
$a_8 =$	0,022379	$sa_8 =$	0,041034
		R = 0,9723 / R ² = 0,9453	
		$\Sigma e^2 = 0,1591$	
		F _{obs} (8,48) = 103,7242	

TABELA 6-21 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 50% VAPORIZADOS

Modelo Linear 01	$T50\%_{Corr01} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 = 0,380654$	$sa_0 = 0,075501$	$R = 0,9251 / R^2 = 0,8558$
$a_1 = 0,507911$	$sa_1 = 0,067310$	$\Sigma e^2 = 0,4256$
$a_2 = -0,387100$	$sa_2 = 0,072066$	$F_{obs}(2,56) = 166,1679$

TABELA 6-22 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 50% VAPORIZADOS

Modelo Linear 02	$T50\%_{Corr02} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (PY-01) + a_3 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 = 0,055515$	$sa_0 = 0,036843$	$R = 0,9126 / R^2 = 0,8328$
$a_1 = 0,859581$	$sa_1 = 0,065361$	$\Sigma e^2 = 0,4934$
$a_2 = -0,200648$	$sa_2 = 0,063664$	$F_{obs}(3,55) = 91,34233$
$a_3 = 0,118505$	$sa_3 = 0,054042$	

TABELA 6-23 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 50% VAPORIZADOS

Modelo Linear 03	$T50\%_{Corr03} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01) + a_2 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 = -0,015116$	$sa_0 = 0,137058$	$R = 0,9180 / R^2 = 0,8428$
$a_1 = 0,989879$	$sa_1 = 0,143484$	$\Sigma e^2 = 0,4640$
$a_2 = 0,134289$	$sa_2 = 0,143503$	$F_{obs}(2,56) = 150,1025$

TABELA 6-24 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 50% VAPORIZADOS

Modelo Linear 04	$T50\%_{Corr04} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01)$	
$a_0 = 0,111182$	$sa_0 = 0,023834$	$R = 0,9167 / R^2 = 0,8403$
$a_1 = 0,864003$	$sa_1 = 0,049885$	$\Sigma e^2 = 0,4713$
		$F_{obs}(1,57) = 299,9835$

TABELA 6-25 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 50% VAPORIZADOS

Modelo Linear 05		$T50\%_{Corr05} = a_0 + a_1 \cdot (TI-03) + a_2 \cdot (TI-05) + a_3 \cdot (FIC-04) + a_4$ $\cdot (FIC-06) + a_5 \cdot (PY-01) + a_6 \cdot (TY-01) + a_7$ $\cdot (FFI-01) + a_8 \cdot (FFI-02)$			
$a_0 =$	0,034768	$sa_0 =$	0,206454	R = 0,9264 / R² = 0,8582 Σ e² =0,4187 F _{obs} (8,50) = 37,80985	
$a_1 =$	0,076884	$sa_1 =$	0,090295		
$a_2 =$	-0,138828	$sa_2 =$	0,096112		
$a_3 =$	0,078404	$sa_3 =$	0,077138		
$a_4 =$	-0,091591	$sa_4 =$	0,123463		
$a_5 =$	0,081809	$sa_5 =$	0,104858		
$a_6 =$	0,963969	$sa_6 =$	0,270918		
$a_7 =$	0,049652	$sa_7 =$	0,280341		
$a_8 =$	-0,064649	$sa_8 =$	0,064002		

TABELA 6-26 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 50% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 01		$T50\%_{Corr01} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 =$	0,417223	$sa_0 =$	0,052961	R = 0,9581 / R² = 0,9179 Σ e² = 0,2002 F _{obs} (2,54) = 301,9055
$a_1 =$	0,447448	$sa_1 =$	0,047676	
$a_2 =$	0,409497	$sa_2 =$	0,050425	

TABELA 6-27 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 50% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 02		$T50\%_{Corr02} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (PY-01) + a_3 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 =$	0,402377	$sa_0 =$	0,056613	R = 0,9585 / R² = 0,9188 Σ e² = 0,1981 F _{obs} (3,53) = 199,9086
$a_1 =$	0,488779	$sa_1 =$	0,072271	
$a_2 =$	-0,037752	$sa_2 =$	0,049462	
$a_3 =$	-0,383065	$sa_3 =$	0,061333	

TABELA 6-28 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 50% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 03		$T50\%_{Corr03} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01) + a_2 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 =$	0,040861	$sa_0 =$	0,093165	R = 0,9570 / R ² = 0,9158 Σ e ² = 0,2054 F _{obs} (2,54) = 293,6529
$a_1 =$	0,899999	$sa_1 =$	0,097897	
$a_2 =$	0,077665	$sa_2 =$	0,097517	

TABELA 6-29 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 50% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 04		$T50\%_{Corr04} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01)$	
$a_0 =$	0,113933	$sa_0 =$	0,016120
$a_1 =$	0,826926	$sa_1 =$	0,034027
		R = 0,9565 / R ² = 0,9148	
		$\Sigma e^2 = 0,2078$	
		F _{obs} (1,55) = 590,5986	

TABELA 6-30 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 50% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 05		$T50\%_{Corr05} = a_0 + a_1 \cdot (TI-03) + a_2 \cdot (TI-05) + a_3 \cdot (FIC-04) + a_4$ $\cdot (FIC-06) + a_5 \cdot (PY-01) + a_6 \cdot (TY-01) + a_7$ $\cdot (FFI-01) + a_8 \cdot (FFI-02)$	
$a_0 =$	0,123579	$sa_0 =$	0,137731
$a_1 =$	0,089131	$sa_1 =$	0,060110
$a_2 =$	-0,134352	$sa_2 =$	0,063877
$a_3 =$	0,060705	$sa_3 =$	0,051588
$a_4 =$	0,058072	$sa_4 =$	0,084296
$a_5 =$	-0,013605	$sa_5 =$	0,071163
$a_6 =$	0,793973	$sa_6 =$	0,181249
$a_7 =$	-0,089060	$sa_7 =$	0,187057
$a_8 =$	0,002096	$sa_8 =$	0,043332
		R = 0,9629 / R ² = 0,9273	
		$\Sigma e^2 = 0,1774$	
		F _{obs} (8,48) = 76,48463	

TABELA 6-31 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 70% VAPORIZADOS

Modelo Linear 01	$T70\%_{Corr01} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 = 0,173264$	$sa_0 = 0,111290$	$R = 0,7708 / R^2 = 0,5941$
$a_1 = 0,483955$	$sa_1 = 0,099217$	$\Sigma e^2 = 0,9248$
$a_2 = -0,150285$	$sa_2 = 0,106228$	$F_{obs}(2,56) = 40,98661$

TABELA 6-32 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 70% VAPORIZADOS

Modelo Linear 02	$T70\%_{Corr02} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (PY-01) + a_3 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 = 0,061398$	$sa_0 = 0,050528$	$R = 0,7699 / R^2 = 0,5927$
$a_1 = 0,658854$	$sa_1 = 0,089638$	$\Sigma e^2 = 0,9279$
$a_2 = -0,115632$	$sa_2 = 0,087310$	$F_{obs}(3,55) = 26,68260$
$a_3 = -0,003352$	$sa_3 = 0,074115$	

TABELA 6-33 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 70% VAPORIZADOS

Modelo Linear 03	$T70\%_{Corr03} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01) + a_2 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 = -0,192476$	$sa_0 = 0,198044$	$R = 0,7581 / R^2 = 0,5748$
$a_1 = 0,930999$	$sa_1 = 0,207329$	$\Sigma e^2 = 0,9688$
$a_2 = 0,335082$	$sa_2 = 0,207358$	$F_{obs}(2,56) = 37,84979$

TABELA 6-34 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 70% VAPORIZADOS

Modelo Linear 04	$T70\%_{Corr04} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01)$	
$a_0 = 0,122668$	$sa_0 = 0,034961$	$R = 0,7450 / R^2 = 0,5550$
$a_1 = 0,616911$	$sa_1 = 0,073173$	$\Sigma e^2 = 1,0140$
		$F_{obs}(1,57) = 71,07893$

TABELA 6-35 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 70% VAPORIZADOS

Modelo Linear 05		$T70\%_{Corr05} = a_0 + a_1 \cdot (TI-03) + a_2 \cdot (TI-05) + a_3 \cdot (FIC-04) + a_4 \cdot (FIC-06) + a_5 \cdot (PY-01) + a_6 \cdot (TY-01) + a_7 \cdot (FFI-01) + a_8 \cdot (FFI-02)$			
$a_0 =$	-0,074673	$sa_0 =$	0,282590	R = 0,8098 / R² = 0,6557 Σ e² = 0,7844 F _{obs} (8,50) = 11,90430	
$a_1 =$	0,179249	$sa_1 =$	0,123593		
$a_2 =$	-0,247615	$sa_2 =$	0,131556		
$a_3 =$	0,082583	$sa_3 =$	0,105584		
$a_4 =$	-0,318479	$sa_4 =$	0,168993		
$a_5 =$	0,252632	$sa_5 =$	0,143527		
$a_6 =$	0,919021	$sa_6 =$	0,370826		
$a_7 =$	0,205313	$sa_7 =$	0,383724		
$a_8 =$	-0,151893	$sa_8 =$	0,087604		

TABELA 6-36 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 70% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 01		$T70\%_{Corr01} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 =$	0,225021	$sa_0 =$	0,081226	R = 0,8331 / R² = 0,6941 Σ e² = 0,4710 F _{obs} (2,54) = 61,27113
$a_1 =$	0,398318	$sa_1 =$	0,073120	
$a_2 =$	-0,181993	$sa_2 =$	0,077336	

TABELA 6-37 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 70% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 02		$T70\%_{Corr02} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (PY-01) + a_3 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 =$	0,213149	$sa_0 =$	0,087174	R = 0,8337 / R² = 0,6950 Σ e² = 0,4696 F _{obs} (3,53) = 40,26220
$a_1 =$	0,431369	$sa_1 =$	0,111284	
$a_2 =$	-0,030189	$sa_2 =$	0,076163	
$a_3 =$	-0,160857	$sa_3 =$	0,094442	

TABELA 6-38 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 70% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 03		$T70\%_{Corr03} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01) + a_2 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 =$	-0,115100	$sa_0 =$	0,141170	R = 0,8329 / R² = 0,6937 Σ e² = 0,4716 F _{obs} (2,54) = 61,16088
$a_1 =$	0,806657	$sa_1 =$	0,148342	
$a_2 =$	0,256792	$sa_2 =$	0,147764	

TABELA 6-39 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 70% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 04		$T70\%_{Corr04} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01)$	
$a_0 =$	0,126506	$sa_0 =$	0,024954
$a_1 =$	0,565046	$sa_1 =$	0,052674
		R = 0,8226 / R ² = 0,6766	
		$\Sigma e^2 = 0,4980$	
		$F_{obs}(1,55) = 115,0751$	

TABELA 6-40 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 70% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 05		$T70\%_{Corr05} = a_0 + a_1 \cdot (TI-03) + a_2 \cdot (TI-05) + a_3 \cdot (FIC-04) + a_4 \cdot (FIC-06) + a_5 \cdot (PY-01) + a_6 \cdot (TY-01) + a_7 \cdot (FFI-01) + a_8 \cdot (FFI-02)$	
$a_0 =$	-0,074673	$sa_0 =$	0,282590
$a_1 =$	0,179249	$sa_1 =$	0,123593
$a_2 =$	-0,247615	$sa_2 =$	0,131556
$a_3 =$	0,082583	$sa_3 =$	0,105584
$a_4 =$	-0,318479	$sa_4 =$	0,168993
$a_5 =$	0,252632	$sa_5 =$	0,143527
$a_6 =$	0,919021	$sa_6 =$	0,370826
$a_7 =$	0,205313	$sa_7 =$	0,383724
$a_8 =$	-0,151893	$sa_8 =$	0,087604
		R = 0,8098 / R ² = 0,6557	
		$\Sigma e^2 = 0,3771$	
		$F_{obs}(8,50) = 11,90430$	

TABELA 6-41 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 90% VAPORIZADOS

Modelo Linear 01	$T90\%_{Corr01} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 = 0,051847$	$sa_0 = 0,150753$	$R = 0,3544 / R^2 = 0,1256$	
$a_1 = 0,345240$	$sa_1 = 0,134399$	$\Sigma e^2 = 1,6969$	
$a_2 = 0,161659$	$sa_2 = 0,143895$	$F_{obs}(2,56) = 4,021637$	

TABELA 6-42 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 90% VAPORIZADOS

Modelo Linear 02	$T90\%_{Corr02} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (PY-01) + a_3 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 = 0,233483$	$sa_0 = 0,068058$	$R = 0,3640 / R^2 = 0,1325$	
$a_1 = 0,306513$	$sa_1 = 0,120738$	$\Sigma e^2 = 1,6835$	
$a_2 = -0,056576$	$sa_2 = 0,117602$	$F_{obs}(3,55) = 2,799765$	
$a_3 = -0,125757$	$sa_3 = 0,099829$		

TABELA 6-43 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 90% VAPORIZADOS

Modelo Linear 03	$T90\%_{Corr03} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01) + a_2 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 = -0,246467$	$sa_0 = 0,262123$	$R = 0,3541 / R^2 = 0,1254$	
$a_1 = 0,704280$	$sa_1 = 0,274413$	$\Sigma e^2 = 1,6972$	
$a_2 = 0,545534$	$sa_2 = 0,274451$	$F_{obs}(2,56) = 4,015687$	

TABELA 6-44 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 90% VAPORIZADOS

Modelo Linear 04	$T90\%_{Corr04} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01)$		
$a_0 = 0,266608$	$sa_0 = 0,046799$	$R = 0,2524 / R^2 = 0,0637$	
$a_1 = 0,192925$	$sa_1 = 0,097950$	$\Sigma e^2 = 1,8170$	
		$F_{obs}(1,57) = 3,879445$	

TABELA 6-45 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 90% VAPORIZADOS

Modelo Linear 05		$T90\%_{Corr05} = a_0 + a_1 \cdot (TI-03) + a_2 \cdot (TI-05) + a_3 \cdot (FIC-04) + a_4 \cdot (FIC-06) + a_5 \cdot (PY-01) + a_6 \cdot (TY-01) + a_7 \cdot (FFI-01) + a_8 \cdot (FFI-02)$	
$a_0 =$	-0,104208	$sa_0 =$	0,362580
$a_1 =$	0,279184	$sa_1 =$	0,158577
$a_2 =$	-0,348010	$sa_2 =$	0,168795
$a_3 =$	-0,001569	$sa_3 =$	0,135471
$a_4 =$	-0,511224	$sa_4 =$	0,216828
$a_5 =$	0,336154	$sa_5 =$	0,184154
$a_6 =$	0,861158	$sa_6 =$	0,475792
$a_7 =$	0,494042	$sa_7 =$	0,492341
$a_8 =$	-0,192610	$sa_8 =$	0,112402
		R = 0,5784 / R ² = 0,3346	
		$\Sigma e^2 = 1,2913$	
		F _{obs} (8,50) = 3,142512	

TABELA 6-46 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 01 PARA 90% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 01		$T90\%_{Corr01} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 =$	0,115669	$sa_0 =$	0,119339
$a_1 =$	0,239864	$sa_1 =$	0,107430
$a_2 =$	0,122594	$sa_2 =$	0,113623
		R = 0,3105 / R ² = 0,0964	
		$\Sigma e^2 = 1,0167$	
		F _{obs} (2,54) = 2,880780	

TABELA 6-47 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 02 PARA 90% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 02		$T90\%_{Corr02} = a_0 + a_1 \cdot (TI-02) + a_2 \cdot (PY-01) + a_3 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 =$	0,071707	$sa_0 =$	0,127058
$a_1 =$	0,362253	$sa_1 =$	0,162198
$a_2 =$	-0,111791	$sa_2 =$	0,111008
$a_3 =$	0,200865	$sa_3 =$	0,137650
		R = 0,3367 / R ² = 0,1134	
		$\Sigma e^2 = 0,9976$	
		F _{obs} (3,53) = 2,259073	

TABELA 6-48 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 03 PARA 90% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 03		$T90\%_{Corr03} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01) + a_2 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 =$	-0,152984	$sa_0 =$	0,204387
$a_1 =$	0,554542	$sa_1 =$	0,214770
$a_2 =$	0,451039	$sa_2 =$	0,213934
		R = 0,3485 / R ² = 0,1215	
		$\Sigma e^2 = 0,9885$	
		F _{obs} (2,54) = 3,732701	

TABELA 6-49 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 04 PARA 90% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 04		$T90\%_{Corr04} = a_0 + a_1 \cdot (TY-01)$	
$a_0 =$	0,271383	$sa_0 =$	0,036578
$a_1 =$	0,130169	$sa_1 =$	0,077208
		R = 0,2217 / R ² = 0,0491	
		$\Sigma e^2 = 1,0699$	
		F _{obs} (1,55) = 2,842412	

TABELA 6-50 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 05 PARA 90% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 05		$T90\%_{Corr05} = a_0 + a_1 \cdot (TI-03) + a_2 \cdot (TI-05) + a_3 \cdot (FIC-04) + a_4 \cdot (FIC-06) + a_5 \cdot (PY-01) + a_6 \cdot (TY-01) + a_7 \cdot (FFI-01) + a_8 \cdot (FFI-02)$	
$a_0 =$	0,034610	$sa_0 =$	0,279861
$a_1 =$	0,295482	$sa_1 =$	0,122140
$a_2 =$	-0,340246	$sa_2 =$	0,129795
$a_3 =$	-0,032155	$sa_3 =$	0,104824
$a_4 =$	-0,287716	$sa_4 =$	0,171285
$a_5 =$	0,196857	$sa_5 =$	0,144597
$a_6 =$	0,601057	$sa_6 =$	0,368286
$a_7 =$	0,282656	$sa_7 =$	0,380087
$a_8 =$	-0,091899	$sa_8 =$	0,088048
		R = 0,5907 / R ² = 0,3489	
		$\Sigma e^2 = 0,7326$	
		F _{obs} (8,48) = 3,215591	

TABELA 6-51 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 06 PARA 90% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 06		$T90\%_{Corr06} = a_0 + a_1 \cdot (T_{10\%}) + a_2 \cdot (T_{50\%}) + a_3 \cdot (TI-02) + a_4 \cdot (FFI-01)$	
$a_0 =$	0,01606	$sa_0 =$	0,121788
$a_1 =$	-1,31003	$sa_1 =$	0,202969
$a_2 =$	1,77747	$sa_2 =$	0,219902
$a_3 =$	0,12753	$sa_3 =$	0,114546
$a_4 =$	0,26907	$sa_4 =$	0,114291
		R = 0,8125 / R ² = 0,6602	
		$\Sigma e^2 = 0,3236$	
		F _{obs} (4,51) = 24,77183	

TABELA 6-52 — RESULTADOS OBTIDOS PARA ML 07 PARA 90% VAPORIZADOS SEM OUTLIERS

Modelo Linear 07		$T90\%_{Corr07} = a_0 + a_1 \cdot (T_{10\%}) + a_2 \cdot (T_{50\%}) + a_3 \cdot (TY-02) + a_4 \cdot (FFI-01)$		
$a_0 =$	-0,14887	$sa_0 =$	0,125785	R = 0,8253 / R² = 0,6811 Σ e² = 0,3037 F _{obs} (4,51) = 27,22878
$a_1 =$	-1,38215	$sa_1 =$	0,197265	
$a_2 =$	1,69564	$sa_2 =$	0,210605	
$a_3 =$	0,47571	$sa_3 =$	0,220361	
$a_4 =$	0,48823	$sa_4 =$	0,130389	

ANEXO B – REDES NEURAIS: RESULTADOS

TABELA 6-53 — RN TIPO 01 / 50% TREINO E 50% TESTE PARA 10% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-7-1	0,963716	0,962043	0,002475	0,002406	13	Exponencial	Identidade
	8-10-1	0,966436	0,960075	0,002256	0,002113	12	Exponencial	Identidade
	8-12-1	0,964999	0,962140	0,002383	0,002557	11	Exponencial	Identidade
	8-4-1	0,963999	0,960234	0,002436	0,002211	13	Exponencial	Identidade
	8-8-1	0,962285	0,959503	0,002635	0,001940	11	Exponencial	Identidade
2	8-12-1	0,964405	0,959592	0,002436	0,002082	12	Exponencial	Identidade
	8-10-1	0,962258	0,964769	0,002518	0,002199	10	Exponencial	Identidade
	8-5-1	0,959164	0,960939	0,002729	0,001827	19	Exponencial	Identidade
	8-12-1	0,965484	0,960206	0,002449	0,002172	11	Exponencial	Identidade
	8-8-1	0,962053	0,959634	0,002623	0,002050	12	Exponencial	Identidade
3	8-12-1	0,961328	0,963539	0,002588	0,002058	10	Exponencial	Identidade
	8-9-1	0,965306	0,963663	0,002458	0,001765	11	Exponencial	Identidade
	8-11-1	0,967307	0,961446	0,002195	0,002416	12	Exponencial	Identidade
	8-12-1	0,925320	0,962020	0,005048	0,003226	4	Exponencial	Logística
	8-12-1	0,963860	0,960399	0,002484	0,002014	12	Exponencial	Identidade

TABELA 6-54 — RN TIPO 01 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 10% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-11-1	0,969409	0,978834	0,001840	0,001281	19	Exponencial	Identidade
	8-4-1	0,960007	0,972822	0,002511	0,001192	17	Exponencial	Identidade
	8-7-1	0,966400	0,973327	0,002035	0,001137	19	Exponencial	Identidade
	8-5-1	0,962112	0,973501	0,002292	0,001275	19	Exponencial	Identidade
	8-4-1	0,954889	0,976090	0,002736	0,001072	18	Exponencial	Identidade
2	8-6-1	0,959870	0,975855	0,002499	0,001419	19	Exponencial	Identidade
	8-9-1	0,917135	0,978526	0,004978	0,001051	3	Identidade	Identidade
	8-7-1	0,965262	0,975793	0,002093	0,001462	19	Exponencial	Identidade
	8-8-1	0,977608	0,974314	0,001350	0,001556	46	Exponencial	Identidade
	8-8-1	0,967236	0,980266	0,001968	0,000990	26	Exponencial	Identidade
3	8-5-1	0,958422	0,976751	0,002501	0,000991	19	Exponencial	Identidade
	8-7-1	0,966330	0,974098	0,002024	0,001437	19	Exponencial	Identidade
	8-7-1	0,960432	0,973453	0,002397	0,001233	19	Exponencial	Identidade
	8-6-1	0,961603	0,974359	0,002346	0,001371	20	Exponencial	Identidade
	8-6-1	0,967585	0,972917	0,001953	0,001476	21	Exponencial	Identidade

TABELA 6-55 — RN TIPO 01 / 90% TREINO E 10% TESTE PARA 10% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-7-1	0,902381	0,995821	0,005227	0,002503	3	Identidade	Identidade
	8-6-1	0,911476	0,996496	0,005971	0,002435	7	Identidade	Identidade
	8-11-1	0,865439	0,994603	0,008236	0,001447	4	Identidade	Tanh
	8-11-1	0,909322	0,999147	0,005068	0,004571	4	Identidade	Identidade
	8-10-1	0,919617	0,994686	0,006574	0,000606	2	Tanh	Identidade
2	8-10-1	0,917313	0,997643	0,006177	0,004056	3	Exponencial	Exponencial
	8-5-1	0,906635	0,998961	0,004932	0,000624	5	Identidade	Identidade
	8-12-1	0,917436	0,998266	0,004375	0,001036	3	Identidade	Identidade
	8-6-1	0,891203	0,997434	0,006887	0,003036	7	Identidade	Identidade
	8-11-1	0,914916	0,996713	0,005288	0,001784	3	Exponencial	Identidade
3	8-4-1	0,914693	0,995314	0,004570	0,001722	4	Identidade	Identidade
	8-12-1	0,886488	0,995096	0,008516	0,003805	3	Exponencial	Exponencial
	8-7-1	0,919465	0,990572	0,004472	0,002637	4	Identidade	Identidade
	8-12-1	0,931324	0,990753	0,004546	0,003781	5	Exponencial	Tanh
	8-4-1	0,928257	0,997539	0,003819	0,001352	3	Identidade	Identidade

TABELA 6-56 — RN TIPO 02 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 10% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	11-9-1	0,642977	0,958869	0,019473	0,005852	7	Exponencial	Logística
	11-12-1	0,958836	0,941059	0,002461	0,005353	41	Logística	Identidade
	11-9-1	0,828720	0,944869	0,010324	0,003469	10	Exponencial	Logística
	11-7-1	0,956939	0,957820	0,002573	0,002727	28	Tanh	Identidade
	11-5-1	0,979836	0,955132	0,001236	0,002363	69	Logística	Identidade
2	11-13-1	0,744987	0,960531	0,013597	0,002119	9	Exponencial	Logística
	11-9-1	0,641059	0,938070	0,018031	0,004325	5	Exponencial	Logística
	11-4-1	0,949483	0,938657	0,003023	0,004025	22	Tanh	Identidade
	11-10-1	0,939155	0,938706	0,003621	0,003808	30	Tanh	Tanh
	11-7-1	0,980782	0,950657	0,001194	0,003039	46	Tanh	Logística
3	11-9-1	0,630534	0,938608	0,020212	0,007075	8	Exponencial	Logística
	11-6-1	0,768520	0,955998	0,013999	0,003476	8	Exponencial	Logística
	11-14-1	0,794943	0,944791	0,011734	0,004937	8	Exponencial	Logística
	11-8-1	0,980363	0,964965	0,001200	0,001742	40	Tanh	Logística
	11-14-1	0,767590	0,949510	0,015154	0,003424	5	Exponencial	Logística

TABELA 6-57 — RN TIPO 03 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 10% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	2-4-1	0,944731	0,975538	0,003274	0,001010	3	Tanh	Identidade
	2-4-1	0,945331	0,976282	0,003340	0,001036	4	Tanh	Identidade
	2-5-1	0,936769	0,975481	0,003883	0,001035	4	Tanh	Identidade
	2-4-1	0,945335	0,976280	0,003340	0,001036	4	Tanh	Identidade
	2-5-1	0,971581	0,977775	0,001707	0,001591	96	Tanh	Tanh
2	2-5-1	0,945253	0,975909	0,003252	0,000994	3	Tanh	Identidade
	2-5-1	0,942771	0,975893	0,003436	0,001033	4	Exponencial	Logística
	2-3-1	0,948197	0,975102	0,003074	0,001037	4	Tanh	Identidade
	2-4-1	0,948359	0,975068	0,003065	0,001044	2	Tanh	Identidade
	2-3-1	0,946412	0,976426	0,003186	0,000977	4	Tanh	Identidade
3	2-4-1	0,945242	0,976334	0,003255	0,000994	7	Tanh	Identidade
	2-5-1	0,949109	0,977043	0,003059	0,000985	4	Logística	Identidade
	2-5-1	0,945915	0,975159	0,003208	0,001026	4	Tanh	Identidade
	2-5-1	0,941580	0,975014	0,003626	0,001061	4	Tanh	Identidade
	2-3-1	0,946630	0,975509	0,003233	0,001051	4	Tanh	Identidade

TABELA 6-58 — RN TIPO 01 / 50% TREINO E 50% TESTE PARA 30% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-4-1	0,953371	0,951881	0,003237	0,003659	8	Tanh	Identidade
	8-4-1	0,951284	0,955138	0,003776	0,002058	7	Logística	Logística
	8-4-1	0,957313	0,950066	0,002996	0,002976	13	Exponencial	Identidade
	8-7-1	0,960184	0,951758	0,002798	0,002496	11	Exponencial	Identidade
	8-12-1	0,965356	0,952911	0,002467	0,002771	8	Logística	Identidade
2	8-11-1	0,962660	0,951281	0,002627	0,002560	12	Exponencial	Identidade
	8-10-1	0,961736	0,950520	0,002679	0,002678	11	Exponencial	Identidade
	8-10-1	0,961695	0,950759	0,002676	0,002697	11	Exponencial	Identidade
	8-11-1	0,959086	0,950182	0,002843	0,002191	11	Exponencial	Identidade
	8-8-1	0,963571	0,949369	0,002632	0,003172	8	Logística	Identidade
3	8-10-1	0,959774	0,955699	0,002833	0,002116	12	Exponencial	Identidade
	8-11-1	0,964520	0,950575	0,002500	0,002611	12	Exponencial	Identidade
	8-8-1	0,962385	0,952557	0,002681	0,002039	12	Exponencial	Identidade
	8-7-1	0,963110	0,949954	0,002748	0,003678	8	Exponencial	Logística
	8-10-1	0,963566	0,950509	0,002572	0,002512	12	Exponencial	Identidade

TABELA 6-59 — RN TIPO 01 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 30% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-4-1	0,949345	0,979354	0,003018	0,001018	28	Exponencial	Identidade
	8-5-1	0,955031	0,981813	0,002681	0,001670	18	Exponencial	Identidade
	8-7-1	0,952560	0,983195	0,002824	0,001521	18	Exponencial	Identidade
	8-8-1	0,951197	0,978207	0,002957	0,001491	16	Exponencial	Identidade
	8-5-1	0,951638	0,980364	0,002922	0,001147	18	Exponencial	Identidade
2	8-8-1	0,940011	0,975191	0,003546	0,001268	6	Identidade	Identidade
	8-4-1	0,949115	0,975510	0,003117	0,001004	21	Exponencial	Identidade
	8-7-1	0,954725	0,976254	0,002712	0,001939	17	Exponencial	Identidade
	8-8-1	0,942957	0,974429	0,003457	0,001288	5	Identidade	Identidade
	8-5-1	0,946089	0,981454	0,003199	0,001435	18	Exponencial	Identidade
3	8-7-1	0,954384	0,976107	0,002724	0,001001	21	Exponencial	Identidade
	8-6-1	0,958689	0,976129	0,002473	0,001678	21	Exponencial	Identidade
	8-4-1	0,941901	0,974155	0,003482	0,001667	6	Identidade	Identidade
	8-5-1	0,946458	0,975670	0,003181	0,001870	14	Exponencial	Identidade
	8-10-1	0,956440	0,975469	0,002622	0,001744	20	Exponencial	Identidade

TABELA 6-60 — RN TIPO 01 / 90% TREINO E 10% TESTE PARA 30% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-4-1	0,956517	0,995634	0,002299	0,001522	33	Exponencial	Identidade
	8-7-1	0,934633	0,996238	0,003422	0,000880	10	Identidade	Identidade
	8-12-1	0,933202	0,995623	0,003546	0,002349	6	Exponencial	Logística
	8-12-1	0,923809	0,995497	0,003948	0,002381	5	Tanh	Exponencial
	8-9-1	0,935573	0,995721	0,003396	0,001083	10	Identidade	Identidade
2	8-10-1	0,935874	0,995325	0,003384	0,000927	9	Identidade	Identidade
	8-12-1	0,922937	0,995422	0,004072	0,001180	8	Identidade	Identidade
	8-7-1	0,928792	0,995426	0,003704	0,002432	9	Tanh	Exponencial
	8-11-1	0,935643	0,995315	0,003359	0,000974	10	Identidade	Identidade
	8-9-1	0,933634	0,995414	0,003501	0,001140	10	Identidade	Identidade
3	8-10-1	0,933215	0,995937	0,003602	0,001574	8	Identidade	Identidade
	8-12-1	0,920158	0,995039	0,004416	0,002799	5	Exponencial	Logística
	8-12-1	0,917859	0,996273	0,004678	0,002139	5	Tanh	Exponencial
	8-10-1	0,927985	0,996652	0,003759	0,002845	5	Tanh	Exponencial
	8-9-1	0,929894	0,995560	0,003711	0,001335	9	Identidade	Identidade

TABELA 6-61 — RN TIPO 02 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 30% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	11-4-1	0,961600	0,962630	0,002310	0,003308	29	Tanh	Tanh
	11-7-1	0,967460	0,964571	0,002109	0,003154	19	Tanh	Logística
	11-13-1	0,965634	0,962590	0,002211	0,003959	18	Tanh	Logística
	11-12-1	0,971440	0,962381	0,001750	0,003341	28	Tanh	Tanh
	11-6-1	0,964410	0,966361	0,002147	0,005000	25	Exponencial	Logística
2	11-5-1	0,972158	0,962016	0,001690	0,004326	26	Tanh	Logística
	11-6-1	0,963674	0,959603	0,002209	0,003572	19	Tanh	Logística
	11-9-1	0,968342	0,961164	0,002047	0,003754	19	Tanh	Logística
	11-10-1	0,973054	0,960766	0,001622	0,004522	24	Exponencial	Logística
	11-4-1	0,971442	0,959631	0,001725	0,005328	24	Tanh	Logística
3	11-6-1	0,954431	0,961087	0,002906	0,002956	15	Tanh	Logística
	11-6-1	0,972610	0,963754	0,001654	0,004995	25	Exponencial	Logística
	11-9-1	0,974171	0,966347	0,001566	0,005421	26	Exponencial	Tanh
	11-13-1	0,975014	0,961021	0,001534	0,003896	34	Tanh	Tanh
	11-11-1	0,966185	0,961328	0,002143	0,003922	20	Tanh	Logística

TABELA 6-62 — RN TIPO 03 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 30% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	2-5-1	0,938202	0,989985	0,003803	0,000676	3	Logística	Tanh
	2-3-1	0,946451	0,986975	0,003184	0,001093	4	Logística	Tanh
	2-3-1	0,946281	0,986845	0,003194	0,001122	4	Logística	Tanh
	2-5-1	0,945569	0,987060	0,003298	0,000717	4	Logística	Tanh
	2-5-1	0,937260	0,987077	0,003835	0,000839	4	Logística	Tanh
2	2-3-1	0,945368	0,984968	0,003378	0,000717	4	Logística	Tanh
	2-3-1	0,940355	0,990200	0,003657	0,000646	4	Logística	Tanh
	2-3-1	0,947371	0,985198	0,003169	0,001051	7	Logística	Logística
	2-5-1	0,943045	0,986919	0,003456	0,000782	4	Logística	Tanh
	2-5-1	0,944907	0,988213	0,003311	0,000713	3	Logística	Tanh
3	2-5-1	0,932019	0,988362	0,004518	0,000480	3	Tanh	Tanh
	2-4-1	0,946741	0,985886	0,003268	0,000647	5	Logística	Identidade
	2-4-1	0,945645	0,987572	0,003299	0,000677	5	Logística	Identidade
	2-4-1	0,941016	0,989314	0,003633	0,000586	3	Logística	Identidade
	2-4-1	0,943129	0,990680	0,003524	0,000596	4	Logística	Tanh

TABELA 6-63 — RN TIPO 01 / 50% TREINO E 50% TESTE PARA 50% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-7-1	0,940437	0,930502	0,003763	0,004514	9	Tanh	Logística
	8-8-1	0,931894	0,930330	0,004323	0,003269	12	Exponencial	Identidade
	8-9-1	0,935039	0,933422	0,004282	0,003185	9	Logística	Logística
	8-12-1	0,930001	0,930626	0,004403	0,003513	9	Exponencial	Logística
	8-8-1	0,934027	0,935622	0,004190	0,003932	11	Exponencial	Logística
2	8-8-1	0,929061	0,935908	0,004456	0,003732	7	Tanh	Identidade
	8-5-1	0,924760	0,932592	0,004767	0,004139	9	Exponencial	Logística
	8-4-1	0,932285	0,929856	0,004256	0,004036	11	Exponencial	Logística
	8-7-1	0,931885	0,931550	0,004335	0,002896	14	Exponencial	Identidade
	8-7-1	0,928626	0,933401	0,004491	0,004255	10	Exponencial	Logística
3	8-11-1	0,925090	0,932389	0,004722	0,003602	11	Logística	Identidade
	8-4-1	0,940297	0,931326	0,003785	0,004248	12	Logística	Tanh
	8-9-1	0,936387	0,929047	0,004029	0,003030	19	Exponencial	Identidade
	8-5-1	0,931985	0,932054	0,004313	0,003832	9	Exponencial	Logística
	8-5-1	0,927643	0,929538	0,004813	0,003181	8	Exponencial	Logística

TABELA 6-64 — RN TIPO 01 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 50% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-5-1	0,891737	0,961701	0,005655	0,002101	6	Exponencial	Logística
	8-12-1	0,917482	0,963403	0,004761	0,002493	6	Logística	Logística
	8-7-1	0,908359	0,961296	0,005099	0,001655	8	Exponencial	Logística
	8-5-1	0,944753	0,967418	0,002966	0,001678	35	Exponencial	Identidade
	8-6-1	0,908829	0,960984	0,004791	0,002712	8	Exponencial	Logística
2	8-12-1	0,917673	0,961459	0,004322	0,002093	7	Exponencial	Logística
	8-6-1	0,887616	0,964471	0,005916	0,002389	8	Logística	Logística
	8-11-1	0,912733	0,963576	0,004560	0,002517	8	Exponencial	Logística
	8-5-1	0,906868	0,963487	0,004897	0,002087	8	Exponencial	Logística
	8-11-1	0,913132	0,959103	0,004623	0,002083	8	Exponencial	Logística
3	8-12-1	0,906855	0,963415	0,005066	0,002310	8	Identidade	Identidade
	8-8-1	0,917456	0,959819	0,004336	0,003184	8	Exponencial	Logística
	8-6-1	0,923056	0,962323	0,004059	0,002752	11	Exponencial	Logística
	8-11-1	0,910073	0,959948	0,004930	0,001754	8	Exponencial	Logística
	8-7-1	0,898742	0,962925	0,005321	0,001633	8	Exponencial	Logística

TABELA 6-65 — RN TIPO 01 / 90% TREINO E 10% TESTE PARA 50% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-11-1	0,963205	0,995029	0,001754	0,000368	47	Tanh	Logística
	8-5-1	0,943722	0,996780	0,002676	0,000425	33	Exponencial	Identidade
	8-8-1	0,952624	0,994828	0,002244	0,000589	46	Tanh	Logística
	8-4-1	0,940218	0,994832	0,002838	0,001120	33	Exponencial	Identidade
	8-11-1	0,955460	0,998065	0,002113	0,000305	42	Tanh	Logística
2	8-8-1	0,917134	0,993546	0,003855	0,001467	14	Exponencial	Identidade
	8-9-1	0,905087	0,994099	0,004387	0,001866	8	Tanh	Exponencial
	8-11-1	0,902795	0,994240	0,004502	0,002671	6	Tanh	Exponencial
	8-4-1	0,916836	0,995232	0,003900	0,001243	18	Exponencial	Identidade
	8-6-1	0,903420	0,993733	0,004504	0,002749	7	Tanh	Exponencial
3	8-4-1	0,903344	0,994437	0,004559	0,001971	12	Logística	Logística
	8-4-1	0,941443	0,994767	0,002769	0,000503	30	Exponencial	Identidade
	8-6-1	0,904735	0,993795	0,004413	0,002352	6	Tanh	Exponencial
	8-4-1	0,936567	0,995010	0,002992	0,001409	33	Exponencial	Identidade
	8-4-1	0,910272	0,993457	0,004160	0,001576	16	Exponencial	Identidade

TABELA 6-66 — RN TIPO 02 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 50% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	11-13-1	0,933385	0,969078	0,003552	0,004930	21	Tanh	Identidade
	11-13-1	0,956799	0,970990	0,002345	0,004522	33	Logística	Tanh
	11-8-1	0,960637	0,974375	0,002167	0,004086	26	Tanh	Tanh
	11-10-1	0,962352	0,974732	0,002042	0,004689	33	Tanh	Tanh
	11-5-1	0,935331	0,971074	0,003439	0,005603	18	Tanh	Identidade
2	11-6-1	0,923850	0,978534	0,004202	0,002690	25	Tanh	Tanh
	11-10-1	0,929533	0,970924	0,003720	0,005007	21	Tanh	Identidade
	11-6-1	0,947913	0,971889	0,002785	0,004235	19	Tanh	Tanh
	11-4-1	0,940431	0,972496	0,003199	0,003900	19	Tanh	Tanh
	11-9-1	0,968913	0,973244	0,001681	0,005061	33	Tanh	Tanh
3	11-11-1	0,912695	0,972464	0,004706	0,002423	22	Tanh	Tanh
	11-13-1	0,962865	0,975994	0,002010	0,004726	37	Tanh	Tanh
	11-5-1	0,946948	0,972736	0,002926	0,006064	28	Logística	Tanh
	11-14-1	0,961846	0,970842	0,002083	0,004876	27	Tanh	Tanh
	11-14-1	0,959282	0,976621	0,002198	0,004697	34	Tanh	Tanh

TABELA 6-67 — RN TIPO 03 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 50% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	2-4-1	0,925845	0,960439	0,003925	0,001783	4	Logística	Tanh
	2-3-1	0,924160	0,960089	0,004301	0,001590	7	Logística	Tanh
	2-3-1	0,917593	0,968602	0,004345	0,001700	4	Logística	Tanh
	2-5-1	0,914582	0,965079	0,004568	0,001660	4	Tanh	Tanh
	2-4-1	0,896077	0,964288	0,005756	0,001820	5	Logística	Identidade
2	2-5-1	0,931792	0,961649	0,003601	0,002091	6	Logística	Tanh
	2-3-1	0,915621	0,966234	0,004419	0,001969	4	Logística	Tanh
	2-3-1	0,915659	0,966305	0,004418	0,001979	4	Logística	Tanh
	2-3-1	0,930402	0,965907	0,003671	0,001745	25	Tanh	Exponencial
	2-5-1	0,912144	0,970662	0,004677	0,001377	4	Logística	Tanh
3	2-4-1	0,900939	0,966675	0,005229	0,001714	4	Logística	Tanh
	2-4-1	0,928157	0,969578	0,003956	0,001367	5	Logística	Logística
	2-4-1	0,901948	0,966377	0,005216	0,001753	4	Logística	Tanh
	2-3-1	0,914635	0,969291	0,004496	0,001705	4	Logística	Tanh
	2-5-1	0,903148	0,966320	0,005245	0,001552	3	Logística	Tanh

TABELA 6-68 — RN TIPO 01 / 50% TREINO E 50% TESTE PARA 70% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-7-1	0,885032	0,804920	0,005470	0,007009	23	Tanh	Identidade
	8-6-1	0,853717	0,818381	0,006830	0,005596	19	Exponencial	Tanh
	8-4-1	0,802270	0,803900	0,009111	0,006376	6	Tanh	Tanh
	8-7-1	0,814023	0,797383	0,008700	0,007734	5	Tanh	Identidade
	8-8-1	0,869280	0,806888	0,006169	0,006405	27	Logística	Exponencial
2	8-6-1	0,861618	0,825980	0,006509	0,004894	25	Exponencial	Tanh
	8-6-1	0,873645	0,809470	0,005950	0,005541	26	Exponencial	Tanh
	8-5-1	0,818335	0,800985	0,008340	0,006167	8	Tanh	Logística
	8-6-1	0,881956	0,803246	0,005586	0,006442	29	Logística	Identidade
	8-8-1	0,852729	0,804847	0,006882	0,005892	21	Exponencial	Tanh
3	8-4-1	0,910605	0,804448	0,004344	0,005559	40	Exponencial	Tanh
	8-4-1	0,858992	0,816071	0,006596	0,005302	20	Exponencial	Tanh
	8-6-1	0,868984	0,810956	0,006155	0,005413	24	Exponencial	Tanh
	8-7-1	0,877616	0,806049	0,005794	0,006333	27	Tanh	Identidade
	8-7-1	0,865531	0,805509	0,006320	0,006119	31	Logística	Tanh

TABELA 6-69 — RN TIPO 01 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 70% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-5-1	0,824239	0,870094	0,006495	0,004742	22	Exponencial	Tanh
	8-5-1	0,818055	0,871599	0,006702	0,004362	28	Exponencial	Tanh
	8-4-1	0,861268	0,890987	0,005231	0,003766	41	Logística	Tanh
	8-4-1	0,870666	0,865312	0,004895	0,004626	30	Exponencial	Identidade
	8-5-1	0,877279	0,875460	0,004661	0,004242	36	Exponencial	Tanh
2	8-5-1	0,867566	0,889361	0,005016	0,003713	37	Exponencial	Tanh
	8-7-1	0,819697	0,874689	0,006662	0,004553	20	Tanh	Tanh
	8-4-1	0,870947	0,867591	0,004890	0,004294	33	Exponencial	Identidade
	8-12-1	0,847917	0,873236	0,005693	0,004289	38	Logística	Tanh
	8-10-1	0,840420	0,867240	0,005945	0,004420	23	Tanh	Tanh
3	8-7-1	0,877797	0,866406	0,004673	0,004316	59	Logística	Tanh
	8-10-1	0,866624	0,873215	0,005072	0,005899	30	Tanh	Identidade
	8-4-1	0,872173	0,882615	0,004846	0,003787	33	Exponencial	Tanh
	8-11-1	0,791219	0,869276	0,007617	0,004908	7	Tanh	Logística
	8-12-1	0,790502	0,867777	0,007849	0,004653	7	Tanh	Logística

TABELA 6-70 — RN TIPO 01 / 90% TREINO E 10% TESTE PARA 70% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-4-1	0,859365	0,989445	0,004800	0,000627	27	Tanh	Identidade
	8-5-1	0,911870	0,989660	0,003095	0,000713	49	Tanh	Logística
	8-6-1	0,878203	0,988035	0,004189	0,001036	36	Tanh	Logística
	8-4-1	0,895224	0,996359	0,003710	0,000601	27	Tanh	Exponencial
	8-8-1	0,842639	0,989121	0,005328	0,002184	31	Logística	Identidade
2	8-5-1	0,874211	0,998585	0,004307	0,000233	61	Logística	Logística
	8-5-1	0,857647	0,996751	0,004837	0,001570	25	Tanh	Logística
	8-10-1	0,864912	0,997851	0,004618	0,000248	40	Exponencial	Tanh
	8-4-1	0,856448	0,989878	0,004879	0,003527	33	Exponencial	Identidade
	8-5-1	0,853207	0,995082	0,004990	0,001368	35	Logística	Exponencial
3	8-4-1	0,854096	0,995741	0,004940	0,000712	36	Exponencial	Tanh
	8-12-1	0,895113	0,994363	0,003673	0,000655	38	Tanh	Logística
	8-5-1	0,895488	0,997188	0,003664	0,000332	44	Tanh	Tanh
	8-7-1	0,875626	0,993703	0,004260	0,001203	33	Tanh	Logística
	8-9-1	0,899372	0,996103	0,003500	0,000835	49	Tanh	Logística

TABELA 6-71 — RN TIPO 02 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 70% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	11-10-1	0,919882	0,936865	0,003302	0,005371	27	Tanh	Tanh
	11-8-1	0,907670	0,946969	0,003668	0,003971	27	Tanh	Identidade
	11-6-1	0,895198	0,940549	0,004044	0,004436	33	Tanh	Identidade
	11-6-1	0,896438	0,940529	0,004235	0,003547	18	Tanh	Tanh
	11-10-1	0,900908	0,936084	0,003939	0,003313	26	Tanh	Tanh
2	11-4-1	0,870978	0,939628	0,005006	0,003131	24	Exponencial	Logística
	11-4-1	0,893919	0,954539	0,004176	0,002342	23	Tanh	Tanh
	11-4-1	0,915579	0,946298	0,003438	0,004515	31	Logística	Tanh
	11-4-1	0,880790	0,942412	0,004662	0,004265	19	Tanh	Identidade
	11-9-1	0,892080	0,946655	0,004161	0,003684	25	Tanh	Identidade
3	11-10-1	0,883111	0,940149	0,004712	0,002468	27	Tanh	Tanh
	11-8-1	0,896544	0,939730	0,003994	0,005527	22	Logística	Tanh
	11-14-1	0,877097	0,933438	0,004840	0,004785	21	Tanh	Tanh
	11-8-1	0,909761	0,941167	0,003543	0,004748	38	Logística	Tanh
	11-11-1	0,923677	0,936324	0,003070	0,004429	33	Tanh	Tanh

TABELA 6-72 — RN TIPO 03 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 70% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	2-3-1	0,823974	0,832761	0,006529	0,005456	20	Tanh	Logística
	2-3-1	0,818925	0,829430	0,006664	0,005674	31	Logística	Tanh
	2-3-1	0,829816	0,829517	0,006302	0,005772	20	Tanh	Logística
	2-5-1	0,829310	0,828304	0,006319	0,005870	46	Tanh	Logística
	2-5-1	0,822848	0,827399	0,006537	0,005703	43	Tanh	Logística
2	2-3-1	0,827171	0,836612	0,006392	0,005605	139	Tanh	Tanh
	2-3-1	0,747409	0,835360	0,009673	0,005651	3	Logística	Tanh
	2-5-1	0,825130	0,831526	0,006457	0,005742	43	Tanh	Logística
	2-5-1	0,807590	0,830860	0,007095	0,005621	25	Tanh	Tanh
	2-4-1	0,817088	0,837337	0,006736	0,005544	32	Logística	Tanh
3	2-5-1	0,828538	0,828216	0,006345	0,005888	48	Tanh	Logística
	2-4-1	0,825761	0,830332	0,006438	0,005791	62	Tanh	Logística
	2-4-1	0,813871	0,827557	0,006852	0,005658	24	Tanh	Tanh
	2-3-1	0,815848	0,829779	0,006770	0,005795	42	Tanh	Logística
	2-3-1	0,820761	0,832633	0,006606	0,005675	29	Tanh	Logística

TABELA 6-73 — RN TIPO 01 MODIFICADA / 70% TREINO / 30% TESTE PARA 70% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	10-5-1	0,986224	0,985837	0,000555	0,000712	18	Identidade	Identidade
	10-11-1	0,986969	0,985932	0,000527	0,001180	13	Exponencial	Identidade
	10-5-1	0,985921	0,986489	0,000568	0,000748	17	Tanh	Identidade
	10-12-1	0,985372	0,985776	0,000588	0,000821	20	Tanh	Identidade
	10-7-1	0,986133	0,986410	0,000560	0,000895	16	Tanh	Identidade
2	10-5-1	0,985836	0,986722	0,000575	0,000678	20	Identidade	Identidade
	10-5-1	0,985860	0,986851	0,000570	0,000723	15	Tanh	Identidade
	10-7-1	0,985487	0,987879	0,000588	0,000756	15	Tanh	Identidade
	10-6-1	0,986942	0,986420	0,000528	0,000789	16	Tanh	Identidade
	10-13-1	0,986566	0,986160	0,000546	0,000730	19	Logística	Identidade
3	10-9-1	0,985632	0,986232	0,000581	0,000740	17	Logística	Identidade
	10-5-1	0,989966	0,987634	0,000406	0,001192	27	Exponencial	Identidade
	10-8-1	0,990128	0,986998	0,000401	0,001172	24	Exponencial	Identidade
	10-8-1	0,983977	0,986584	0,000651	0,000915	11	Tanh	Identidade
	10-12-1	0,977232	0,986181	0,000988	0,000678	22	Tanh	Tanh

TABELA 6-74 — RN TIPO 02 MODIFICADA / 70% TREINO / 30% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	13-7-1	0,986873	0,983872	0,000535	0,000920	22	Exponencial	Tanh
	13-15-1	0,989970	0,982133	0,000421	0,000634	34	Exponencial	Logística
	13-5-1	0,988523	0,982354	0,000462	0,000762	31	Tanh	Identidade
	13-6-1	0,983213	0,983437	0,000706	0,000581	25	Tanh	Tanh
	13-6-1	0,984860	0,982405	0,000621	0,001026	17	Exponencial	Tanh
2	13-6-1	0,987548	0,981660	0,000501	0,000678	30	Logística	Identidade
	13-8-1	0,984951	0,984332	0,000612	0,000650	24	Exponencial	Tanh
	13-5-1	0,984389	0,982464	0,000653	0,001088	18	Exponencial	Tanh
	13-9-1	0,986012	0,981787	0,000567	0,000926	19	Exponencial	Tanh
	13-6-1	0,985827	0,982266	0,000574	0,000783	19	Exponencial	Tanh
3	13-7-1	0,985556	0,981724	0,000583	0,000930	20	Exponencial	Tanh
	13-5-1	0,991494	0,982755	0,000343	0,000623	34	Tanh	Identidade
	13-7-1	0,982399	0,982667	0,000726	0,000790	16	Exponencial	Tanh
	13-10-1	0,984221	0,982707	0,000646	0,000913	24	Exponencial	Tanh
	13-9-1	0,986642	0,981315	0,000539	0,000740	29	Logística	Identidade

TABELA 6-75 — RN TIPO 03 MODIFICADA / 70% TREINO / 30% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	4-5-1	0,985138	0,990566	0,000597	0,000439	28	Tanh	Identidade
	4-3-1	0,977492	0,990816	0,000928	0,000501	15	Tanh	Logística
	4-3-1	0,979792	0,990550	0,000823	0,000438	19	Logística	Tanh
	4-4-1	0,979020	0,990724	0,000865	0,000393	17	Tanh	Tanh
	4-4-1	0,985790	0,990580	0,000573	0,000411	36	Exponencial	Identidade
2	4-3-1	0,982411	0,990772	0,000717	0,000399	54	Logística	Tanh
	4-3-1	0,978020	0,990715	0,000908	0,000581	12	Tanh	Logística
	4-3-1	0,985709	0,990820	0,000578	0,000412	32	Tanh	Identidade
	4-3-1	0,983356	0,990779	0,000674	0,000405	20	Tanh	Identidade
	4-4-1	0,979375	0,990700	0,000841	0,000376	23	Logística	Tanh
3	4-5-1	0,985745	0,990725	0,000574	0,000407	36	Tanh	Identidade
	4-3-1	0,981719	0,990777	0,000773	0,000419	31	Tanh	Tanh
	4-4-1	0,985076	0,990631	0,000600	0,000431	28	Tanh	Identidade
	4-5-1	0,981273	0,990945	0,000761	0,000380	29	Logística	Tanh
	4-4-1	0,984736	0,990632	0,000615	0,000446	21	Tanh	Identidade

TABELA 6-76 — RN TIPO 01 / 50% TREINO E 50% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-4-1	0,793019	0,773278	0,009243	0,011297	26	Tanh	Tanh
	8-6-1	0,789864	0,785178	0,009488	0,008794	36	Tanh	Logística
	8-12-1	0,634859	0,768438	0,014884	0,009316	30	Logística	Identidade
	8-7-1	0,796497	0,774470	0,010117	0,009221	21	Tanh	Logística
	8-11-1	0,751567	0,772086	0,010877	0,009308	28	Tanh	Tanh
2	8-11-1	0,783161	0,801220	0,009937	0,009976	41	Logística	Tanh
	8-11-1	0,793374	0,762022	0,009301	0,012035	28	Tanh	Identidade
	8-10-1	0,821629	0,777209	0,008469	0,009810	55	Logística	Logística
	8-11-1	0,792349	0,776284	0,010073	0,008970	26	Tanh	Logística
	8-10-1	0,633757	0,761563	0,014910	0,010707	19	Logística	Identidade
3	8-6-1	0,761425	0,754068	0,010608	0,008999	29	Tanh	Logística
	8-11-1	0,773155	0,760257	0,010599	0,009510	19	Tanh	Logística
	8-10-1	0,662962	0,768703	0,013964	0,009723	33	Logística	Identidade
	8-8-1	0,778944	0,763408	0,009925	0,009896	53	Logística	Logística
	8-9-1	0,781524	0,768668	0,009796	0,011835	27	Tanh	Tanh

TABELA 6-77 — RN TIPO 01 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-11-1	0,827538	0,856450	0,005813	0,005461	30	Tanh	Exponencial
	8-7-1	0,868212	0,860042	0,004426	0,005016	32	Tanh	Exponencial
	8-5-1	0,778195	0,839258	0,007068	0,004820	27	Tanh	Logística
	8-7-1	0,729167	0,845848	0,008423	0,006360	24	Tanh	Logística
	8-6-1	0,787266	0,841021	0,006854	0,007090	33	Tanh	Identidade
2	8-10-1	0,900390	0,846489	0,003446	0,004771	32	Tanh	Logística
	8-9-1	0,787333	0,844207	0,007140	0,005878	24	Tanh	Logística
	8-8-1	0,731689	0,831539	0,008469	0,006878	22	Tanh	Logística
	8-4-1	0,760395	0,848020	0,007529	0,006700	35	Exponencial	Tanh
	8-7-1	0,816706	0,835193	0,006054	0,006116	26	Tanh	Exponencial
3	8-8-1	0,833254	0,840035	0,005613	0,004620	25	Tanh	Logística
	8-8-1	0,841804	0,861420	0,005325	0,004205	27	Tanh	Logística
	8-12-1	0,834741	0,830255	0,005515	0,006208	31	Tanh	Logística
	8-5-1	0,826565	0,840179	0,005724	0,006610	27	Tanh	Exponencial
	8-10-1	0,841161	0,865302	0,005516	0,004210	28	Tanh	Logística

TABELA 6-78 — RN TIPO 01 / 90% TREINO E 10% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	8-8-1	0,762276	0,999314	0,006826	0,001514	39	Exponencial	Identidade
	8-7-1	0,752915	0,998636	0,007085	0,004016	35	Exponencial	Tanh
	8-6-1	0,763555	0,998553	0,006831	0,001104	40	Logística	Exponencial
	8-8-1	0,841070	0,999307	0,004783	0,000518	34	Tanh	Exponencial
	8-5-1	0,786371	0,998866	0,006271	0,002845	42	Exponencial	Logística
2	8-12-1	0,788603	0,999697	0,006242	0,003418	41	Exponencial	Identidade
	8-9-1	0,750171	0,997803	0,007182	0,001098	35	Exponencial	Logística
	8-12-1	0,794685	0,998971	0,006100	0,001767	33	Exponencial	Exponencial
	8-9-1	0,798189	0,998234	0,005920	0,002678	43	Exponencial	Identidade
	8-4-1	0,790451	0,998211	0,006111	0,002455	37	Exponencial	Identidade
3	8-8-1	0,758781	0,997886	0,006973	0,001243	32	Exponencial	Identidade
	8-7-1	0,733933	0,996929	0,007514	0,000401	28	Exponencial	Identidade
	8-10-1	0,770704	0,998055	0,006791	0,002709	30	Exponencial	Exponencial
	8-10-1	0,754060	0,997315	0,007049	0,002907	33	Exponencial	Tanh
	8-11-1	0,786071	0,998570	0,006266	0,001760	42	Exponencial	Identidade

TABELA 6-79 — RN TIPO 02 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	11-6-1	0,718236	0,754223	0,008853	0,007635	20	Exponencial	Exponencial
	11-4-1	0,702381	0,767887	0,009088	0,008436	22	Exponencial	Exponencial
	11-4-1	0,745773	0,766761	0,008069	0,008672	24	Exponencial	Exponencial
	11-4-1	0,718196	0,768357	0,008713	0,008104	20	Exponencial	Exponencial
	11-4-1	0,713967	0,759370	0,008817	0,008106	20	Exponencial	Exponencial
2	11-10-1	0,698094	0,715670	0,009134	0,008482	28	Tanh	Tanh
	11-4-1	0,727055	0,762639	0,008429	0,010716	33	Logística	Tanh
	11-4-1	0,827846	0,805121	0,005896	0,008284	41	Logística	Tanh
	11-4-1	0,660160	0,720892	0,010101	0,010871	25	Logística	Identidade
	11-4-1	0,686099	0,717356	0,009709	0,011392	34	Logística	Tanh
3	11-11-1	0,632575	0,776041	0,010864	0,009747	26	Logística	Identidade
	11-5-1	0,615856	0,735284	0,011075	0,007990	19	Tanh	Tanh
	11-4-1	0,724299	0,786502	0,008525	0,008559	24	Exponencial	Exponencial
	11-5-1	0,695097	0,731971	0,009232	0,010601	24	Logística	Identidade
	11-6-1	0,718224	0,750556	0,008692	0,008381	28	Logística	Identidade

TABELA 6-80 — RN TIPO 03 / 70% TREINO E 30% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	2-3-1	0,581089	0,495951	0,011814	0,012656	24	Tanh	Identidade
	2-3-1	0,559710	0,492860	0,012243	0,012698	22	Logística	Tanh
	2-3-1	0,576374	0,509758	0,011898	0,012557	12	Tanh	Tanh
	2-3-1	0,587663	0,530053	0,011688	0,011843	21	Logística	Tanh
	2-4-1	0,629710	0,489505	0,010761	0,012994	34	Tanh	Tanh
2	2-5-1	0,612683	0,503631	0,011147	0,012513	45	Tanh	Tanh
	2-3-1	0,567786	0,500403	0,012077	0,012755	20	Logística	Tanh
	2-3-1	0,607981	0,495085	0,011284	0,012529	27	Tanh	Tanh
	2-3-1	0,606885	0,520553	0,011275	0,011974	35	Logística	Tanh
	2-4-1	0,555893	0,502613	0,012598	0,011906	7	Tanh	Exponencial
3	2-5-1	0,601398	0,510081	0,011381	0,012121	27	Tanh	Tanh
	2-5-1	0,576267	0,514833	0,011933	0,012194	24	Logística	Tanh
	2-4-1	0,651040	0,501442	0,010377	0,012765	42	Tanh	Identidade
	2-3-1	0,592072	0,509361	0,011627	0,012516	28	Logística	Exponencial
	2-3-1	0,592743	0,499555	0,011629	0,012419	22	Logística	Tanh

TABELA 6-81 — RN TIPO 01 MODIFICADA / 70% TREINO / 30% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	10-6-1	0,954197	0,903116	0,001647	0,002938	26	Tanh	Tanh
	10-5-1	0,972148	0,906304	0,000994	0,003643	55	Logística	Tanh
	10-11-1	0,962527	0,902627	0,001312	0,003333	33	Tanh	Identidade
	10-12-1	0,978934	0,901668	0,000746	0,003304	60	Exponencial	Identidade
	10-8-1	0,967477	0,905626	0,001190	0,003377	40	Logística	Tanh
2	10-13-1	0,979613	0,905209	0,000719	0,003032	61	Exponencial	Identidade
	10-4-1	0,973732	0,906842	0,000925	0,003053	83	Logística	Identidade
	10-5-1	0,972945	0,907027	0,000951	0,002941	76	Logística	Identidade
	10-11-1	0,955021	0,905818	0,001588	0,003342	35	Logística	Tanh
	10-4-1	0,974352	0,910942	0,000908	0,003503	46	Tanh	Tanh
3	10-7-1	0,955249	0,906362	0,001643	0,003267	28	Tanh	Tanh
	10-5-1	0,970235	0,906296	0,001054	0,003391	41	Tanh	Tanh
	10-4-1	0,976605	0,906549	0,000825	0,002985	57	Tanh	Identidade
	10-5-1	0,964377	0,912489	0,001257	0,003317	38	Tanh	Tanh
	10-13-1	0,966099	0,903854	0,001190	0,003057	50	Exponencial	Exponencial

TABELA 6-82 — RN TIPO 02 MODIFICADA / 70% TREINO / 30% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	13-13-1	0,917375	0,864089	0,002826	0,004447	13	Tanh	Identidade
	13-11-1	0,887434	0,862180	0,003910	0,004484	18	Logística	Tanh
	13-5-1	0,919628	0,862397	0,002754	0,004543	14	Tanh	Identidade
	13-10-1	0,887210	0,863228	0,003881	0,004408	19	Logística	Tanh
	13-12-1	0,917462	0,863177	0,002861	0,004424	20	Logística	Identidade
2	13-12-1	0,885540	0,864292	0,004004	0,004113	14	Identidade	Tanh
	13-7-1	0,894875	0,865316	0,003707	0,004304	14	Tanh	Tanh
	13-14-1	0,887280	0,863847	0,003993	0,004216	17	Logística	Tanh
	13-12-1	0,886943	0,863712	0,003958	0,004449	18	Logística	Tanh
	13-14-1	0,904468	0,866114	0,003580	0,004098	18	Logística	Tanh
3	13-7-1	0,924823	0,867275	0,002627	0,004120	19	Logística	Identidade
	13-5-1	0,903776	0,866068	0,003376	0,004410	14	Tanh	Tanh
	13-8-1	0,919782	0,865056	0,002820	0,004110	19	Logística	Identidade
	13-14-1	0,917880	0,866817	0,002903	0,004207	17	Logística	Identidade
	13-9-1	0,913852	0,863595	0,002987	0,004374	14	Tanh	Identidade

TABELA 6-83 — RN TIPO 03 MODIFICADA / 70% TREINO / 30% TESTE PARA 90% VAPORIZADOS

Rodada	Arquitetura	Desempenho		Erro		Épocas	Funções de Ativação	
		Treino	Teste	Treino	Teste		Oculto	Saída
1	4-7-1	0,964313	0,899463	0,001269	0,003087	55	Tanh	Tanh
	4-5-1	0,930903	0,900451	0,002397	0,003343	33	Exponencial	Exponencial
	4-3-1	0,962842	0,898816	0,001307	0,003008	40	Tanh	Identidade
	4-8-1	0,954558	0,898929	0,001588	0,003004	31	Tanh	Exponencial
	4-4-1	0,932675	0,900644	0,002370	0,003150	15	Tanh	Logística
2	4-5-1	0,935377	0,900520	0,002239	0,003004	46	Exponencial	Exponencial
	4-5-1	0,934243	0,899480	0,002272	0,002992	45	Exponencial	Exponencial
	4-4-1	0,926512	0,900786	0,002599	0,002964	17	Tanh	Logística
	4-8-1	0,959802	0,899757	0,001413	0,003068	41	Tanh	Identidade
	4-6-1	0,932048	0,900382	0,002344	0,003072	45	Exponencial	Exponencial
3	4-6-1	0,958290	0,900946	0,001456	0,002933	45	Tanh	Exponencial
	4-3-1	0,919495	0,901292	0,002757	0,003004	26	Tanh	Tanh
	4-6-1	0,959082	0,901584	0,001428	0,002965	39	Tanh	Identidade
	4-6-1	0,958286	0,901698	0,001457	0,002910	46	Tanh	Exponencial
	4-5-1	0,961716	0,901619	0,001340	0,003075	46	Tanh	Identidade